

(19) 世界知的所有権機関  
国際事務局



(43) 国際公開日  
2002 年 6 月 6 日 (06.06.2002)

PCT

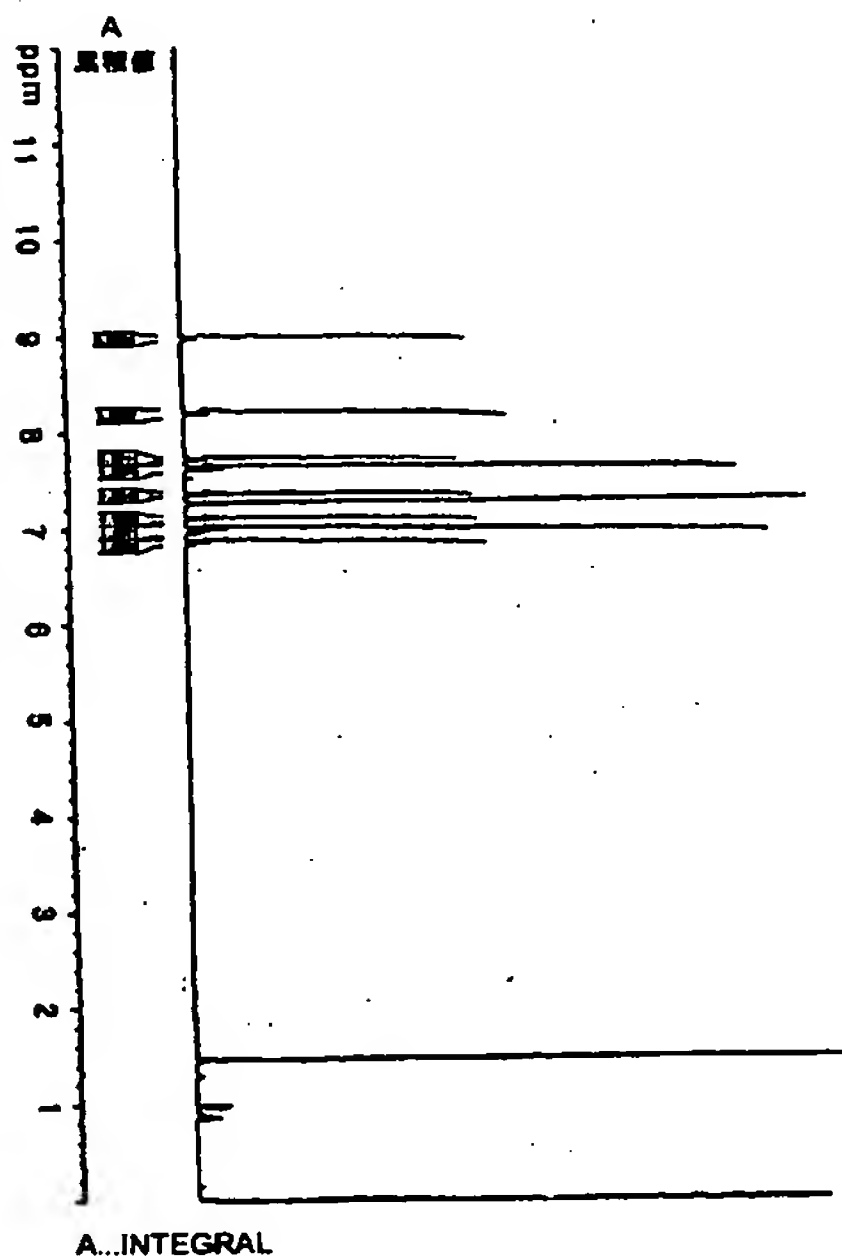
(10) 国際公開番号  
WO 02/44189 A1

- (51) 国際特許分類: C07F 15/00, 19/00, 特願2001-64205 2001 年 3 月 8 日 (08.03.2001) JP  
C09K 11/06, H05B 33/14 特願2001-128928 2001 年 4 月 26 日 (26.04.2001) JP
- (21) 国際出願番号: PCT/JP01/10487 (71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): キヤノン株式会社 (CANON KABUSHIKI KAISHA) [JP/JP]; 〒146-8501 東京都大田区下丸子3丁目30番2号 Tokyo (JP).
- (22) 国際出願日: 2001 年 11 月 30 日 (30.11.2001)
- (25) 国際出願の言語: 日本語 (72) 発明者; および
- (26) 国際公開の言語: 日本語 (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 鎌谷 淳 (KAMATANI, Jun) [JP/JP]; 〒215-0011 神奈川県川崎市麻生区百合丘3-26-4 Kanagawa (JP). 岡田 伸二郎 (OKADA, Shinjiro) [JP/JP]; 〒259-1141 神奈川県伊勢原市上粕屋2639-3 Kanagawa (JP). 坪山 明 (TSUBOYAMA, Akira) [JP/JP]; 〒229-0011 神奈川県
- (30) 優先権データ:  
特願 2000-364650  
2000 年 11 月 30 日 (30.11.2000) JP

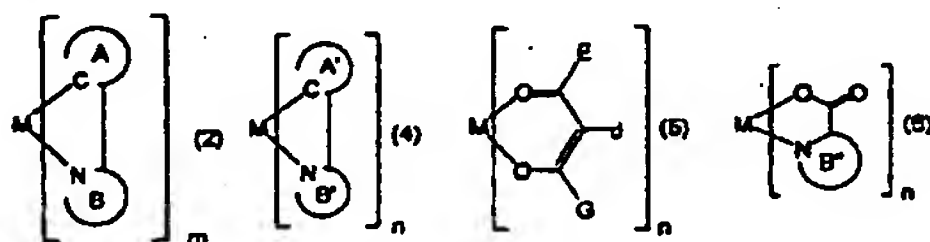
[続葉有]

(54) Title: LUMINESCENT ELEMENT AND DISPLAY

(54) 発明の名称: 発光素子及び表示装置



(57) Abstract: A luminescent element characterized by having a layer containing a metal coordination compound which has a partial structure  $ML_m$  represented by the following general formula (2) and which as a whole is preferably represented by the following formula (3).  $ML_mL'_n$  (3) [In the formula, M represents a metal atom selected among iridium, platinum, rhodium, and palladium, and represent bidentate ligands different from each other; m is 1, 2, or 3 and n is 0, 1, or 2, provided that  $m+n$  is 2 or 3; the partial structure  $ML_m$  is represented by the following general formula (2) (wherein B represents an isoquinolyl group bonded to the metal M through the "N" and cyclic group A, which is bonded to the 1-position carbon atom of the isoquinolyl group, is bonded to the metal M through the "C"); and the partial structure  $ML'_n$  is represented by the following general formula (4), (5), or (6).] The luminescent element luminesces at a high efficiency, retains a high luminance over long, and is suitable for red luminescence. (2) (4) (5) (6)



[続葉有]



県相模原市大野台6-5-4-104 Kanagawa (JP). 滝口隆雄 (TAKIGUCHI, Takao) [JP/JP]; 〒157-0064 東京都世田谷区給田1-10-2 Tokyo (JP). 三浦聖志 (MIURA, Seishi) [JP/JP]; 〒229-0015 神奈川県相模原市下溝327-16 Kanagawa (JP). 野口幸治 (NOGUCHI, Koji) [JP/JP]; 〒228-0814 神奈川県相模原市南台5-10-19 Kanagawa (JP). 森山孝志 (MORIYAMA, Takashi) [JP/JP]; 〒215-0005 神奈川県川崎市麻生区千代ヶ丘4-2-31-B-202 Kanagawa (JP). 井川悟史 (IGAWA, Satoshi) [JP/JP]; 〒251-0044 神奈川県藤沢市辻堂太平台2-3-24 Kanagawa (JP). 古郡 学 (FURUGORI, Manabu) [JP/JP]; 〒243-0004 神奈川県厚木市水引2-6-29 キヤノン 寮 Kanagawa (JP).

(74) 代理人: 弁理士 猿渡章雄 (ENDO, Yukio); 〒105-0001 東京都港区虎ノ門3丁目7番7号 長谷川ビル4階 東京国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国 (国内): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NO, NZ, PH, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZA, ZW.

(84) 指定国 (広域): ARIPO 特許 (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ特許 (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR), OAPI 特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:  
— 国際調査報告書

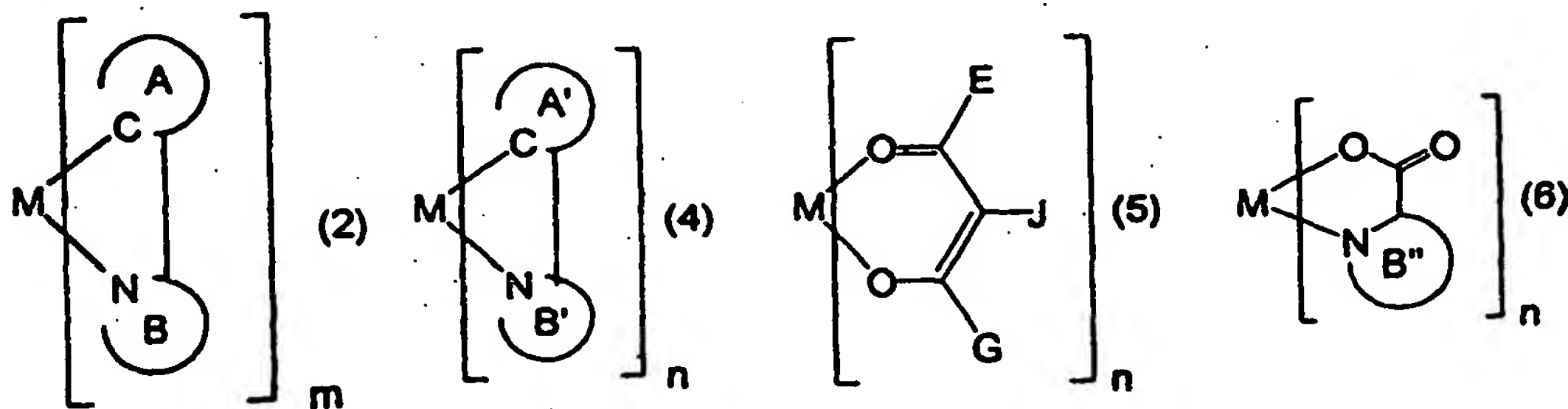
[続葉有]

(57) 要約:

下記一般式 (2) で示される部分構造  $ML_n$  を有し、好ましくは全体として下式 (3) で示される金属配位化合物を含む層を有することを特徴とする発光素子。



[式中MはIr、Pt、RhまたはPdの金属原子であり、互いに異なる二座配位子を示す。mは1または2または3であり、nは0または1または2である。但し、m+nは2または3である。部分構造  $ML_n$  は下記一般式 (2) (但し、BはNで金属Mと結合したイソキノリル基を示し、その1-位の炭素原子に結合した環状基AはそのCで金属Mに結合する) で示され、部分構造  $ML'_n$  は下記一般式 (4)、(5) または (6) で示される。高効率発光で、長い期間高輝度を保ち、赤色発光に適した発光素子を得られる。





2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

## 明 細 書

## 発光素子及び表示装置

## 5      [技術分野]

本発明は、平面光源や平面状ディスプレイ等を使用される有機発光素子（有機エレクトロルミネッセンス素子、あるいは有機EL素子とも言う）及びそれに用いる発光材料に関する。特に、新規の金属配位化合物とそれを用いた発光素子に関するものであり、さらに詳しくは、特定の  
10      構造の金属配位化合物を発光材料として用いることで、発光効率が高く、経時変化が少ない発光素子に関するものである。

## [背景技術]

有機発光素子は、古くはアントラセン蒸着膜に電圧を印加して発光させた例（Thin Solid Films, 94(1982) 171）等がある。しかし近年、無  
15      機発光素子に比べて大面積化が容易であることや、各種新材料の開発によって所望の発色が得られることや、また低電圧で駆動可能であるなどの利点により、さらに高速応答性や高効率の発光素子として、材料開発を含めて、デバイス化のための応用研究が精力的に行われている。

例えば、Macromol. Symp. 125, 1~48 (1997) に詳述されているように、一般に有機EL素子は透明基板上に形成された、上下2層の電極と、この間に発光層を含む有機物層が形成された構成を持つ。  
20     

発光層には、電子輸送性と発光特性を有するアルミキノリノール錯体（代表例としては、以下に示すAlq3）などが用いられる。またホール輸送層には、例えばトリフェニルジアミン誘導体（代表例としては以下に示す $\alpha$ -NPD）など、電子供与性を有する材料が用いられる。  
25



これらの素子は電氣的整流性を示し、電極間に電界を印加すると、陰極から電子が発光層に注入され、陽極からはホールが注入される。

注入されたホールと電子は、発光層内で再結合して励起子を生じ、これが基底状態に遷移する時発光する。

5       この過程で、励起状態には励起1重項状態と3重項状態があり、前者から基底状態への遷移は蛍光と呼ばれ、後者からの遷移は燐光と呼ばれており、これらの状態にある物質を、それぞれ1重項励起子、3重項励起子と呼ぶ。

10       これまで検討されてきた有機発光素子は、その多くが1重項励起子から基底状態に遷移するときの蛍光が利用されている。一方最近、三重項励起子を経由した燐光発光を利用する素子の検討がなされている。

発表されている代表的な文献は、

15       文献1: Improved energy transfer in electrophosphorescent device (D. F. O'Brien他, Applied Physics Letters Vol 74, No 3 p 422 (1999))、

20       文献2: Very high-efficiency green organic light-emitting devices based on electrophosphorescence (M. A. Baldo他, Applied Physics Letters Vol 75, No 1 p 4 (1999)) である。

これらの文献では、電極間に挟持された有機層を4層積層する構成が主に用いられ、用いている材料は、以下に示す構造を有するキャリア輸送材料と燐光発光性材料である。

25       各材料の略称は以下の通りである。

Alq3: アルミニウム-キノリノール錯体

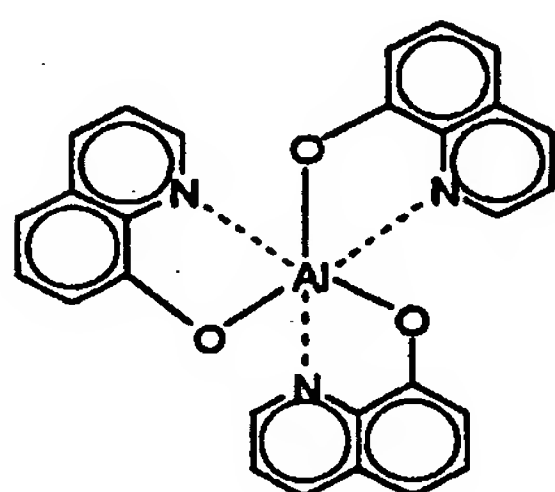
$\alpha$ -NPD: N4, N4'-Di-naphthalene-1-yl  
-N4, N4'-diphenyl-biphenyl-4, 4'-d  
i a m i n e

CBP: 4, 4'-N, N'-dicarbazole-biphen  
y l

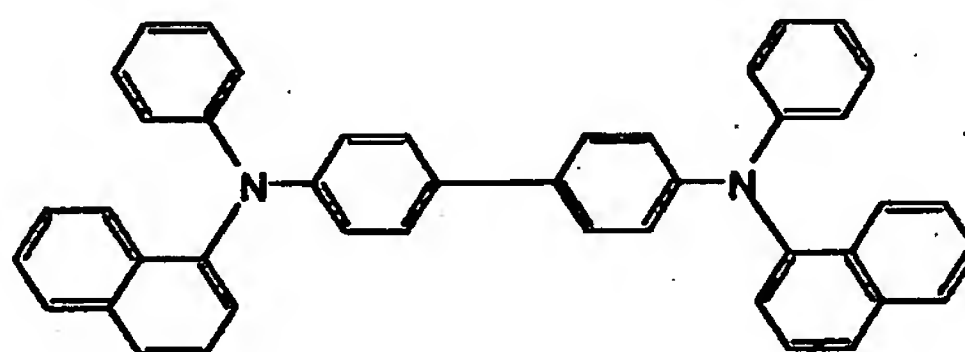
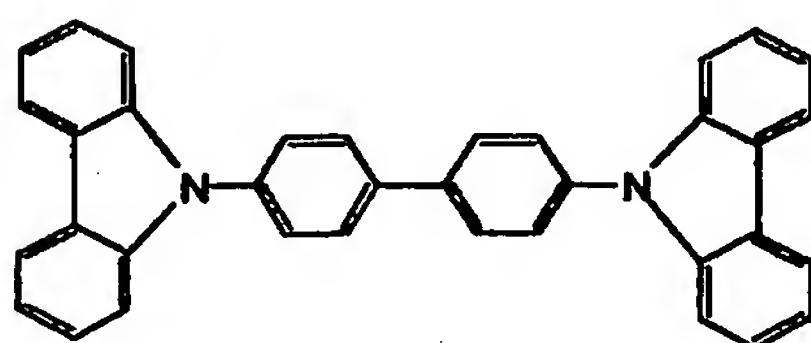
BCP: 2, 9-dimethyl-4, 7-diphenyl-1,  
10-phenanthroline

PtOEP: 白金-オクタエチルポルフィリン錯体

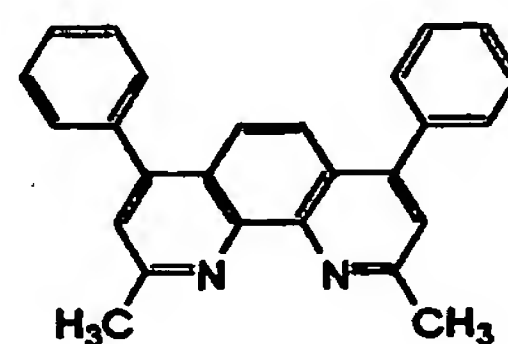
Ir(ppy)<sub>3</sub>: イリジウム-フェニルピリミジン錯体



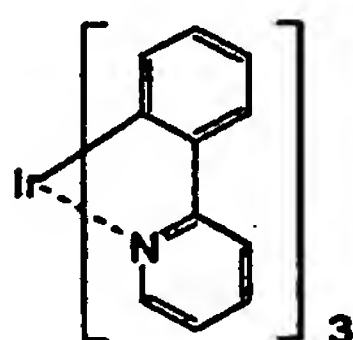
Alq3

 $\alpha$ -NPD

CBP



BCP

Ir(ppy)<sub>3</sub>

10

文献 1、2 ともに、高効率が得られた素子には、ホール輸送層に  $\alpha$ -

NPD、電子輸送層にAlq<sub>3</sub>、励起子拡散防止層にBCP、発光層にCBPをホスト材料として、これに燐光発光性材料であるPtOEPまたはIr(ppy)<sub>3</sub>を6%程度の濃度で分散混入した材料が用いられている。

5 現在燐光性発光材料が特に注目される理由は、以下の理由で原理的に高発光効率が期待できるからである。すなわち、キャリア再結合により生成される励起子は1重項励起子と3重項励起子からなり、その確率は1:3である。これまでの有機EL素子は、蛍光発光を利用していたが、原理的にその発光収率は生成された励起子数に対して、25%でありこれが上限であった。しかし3重項励起子から発生する燐光を用いれば、  
10 原理的に少なくとも3倍の収率が期待され、さらにエネルギー的に高い1重項から3重項への項間交差による転移を考え合わせると、原理的には4倍の100%の発光収率が期待できる。

しかし上記燐光発光を用いた有機発光素子は、一般に蛍光発光型の素子と同様に、発光効率の劣化と素子安定性に関してさらなる改良が求め  
15 られている。

この劣化原因の詳細は不明であるが、本発明者らは燐光発光のメカニズムを踏まえて以下のように考えている。

有機発光層が、キャリア輸送性のホスト材料と燐光発光性のゲストからなる場合、3重項励起子から燐光発光にいたる主な過程は、以下のいくつかの過程からなる。  
20

1. 発光層内での電子・ホール輸送
2. ホストの励起子生成
3. ホスト分子間の励起エネルギー伝達
4. ホストからゲストへの励起エネルギー移動
- 25 5. ゲストの3重項励起子生成
6. ゲストの3重項励起子から基底状態遷移と燐光発光

それぞれの過程における所望のエネルギー移動や発光は、さまざまなエネルギー失活過程との競争反応である。

有機発光素子の発光効率を高めるためには、発光中心材料そのものの発光量子収率を大きくすることは言うまでもない。

5 特に燐光発光物質に於いては、一般に前記3重項励起子の寿命が1重項励起子の寿命より3桁以上長いことに由来するものと考えられる。つまりエネルギーの高い励起状態に保持される時間が長いために、周辺物質との反応や、励起子同士での多量体形成などによって、失活過程が起こる確立が多くなり、ひいては物質の変化をきたし、寿命劣化につながり易いと考えられる。

10 また、フルカラー表示素子形成のための利用を考えると、できるだけ純粋な三原色である青、緑および赤の発光色を与える発光材料が望まれるところ、従来は純粋な赤の発光色を与える発光材料が乏しかったために良好なフルカラー表示素子の実現が制約されていた。

15 [発明の開示]

従って、本発明の主要な目的は、りん光発光素子に用いる発光材料として、高効率発光でかつ、安定性の高い化合物を提供することを目的とする。特に上記エネルギー励起状態での寿命が長いために、エネルギー失活が起きにくく、かつ化学的にも安定で素子寿命を長くすることが可能な発光材料化合物を提供することを目的とする。更には本発明は、フルカラー表示素子形成に適した、純粋な赤色が出せる、赤発光材料化合物を提供することを目的とする。

20 包括的に、本発明は、燐光発光材料を用いて、発光効率が高く、長い期間高輝度を保ち、かつ赤色発光が可能な発光材料を得ること、及びそれを用いた発光素子及び表示装置を提供することを主要な目的とする。

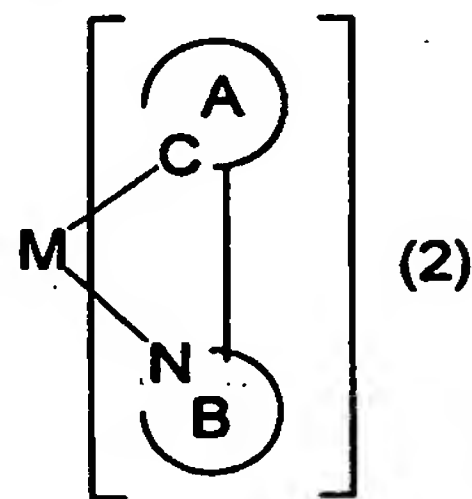
25 本発明では金属錯体を発光材料として用いる。また特にイリジウムを

中心金属とし、かつイソキノリル基を配位子として持った新規な発光性の金属錯体化合物を用いる。

より具体的には、本発明においては、下記一般式（１）で示される部分構造を少なくとも１つ有することを特徴とする金属配位化合物であって、



ここで部分構造MLは下式一般式（２）で表され、



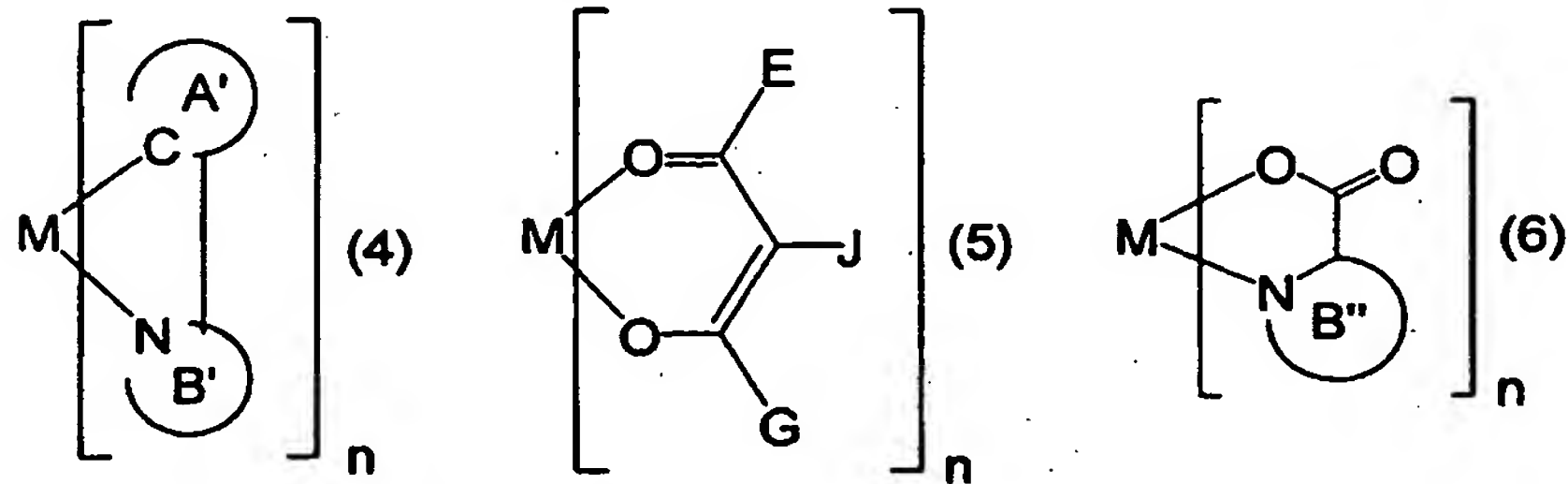
式中MはIr, Pt, RhまたはPdの金属原子であり、NとCは、窒素および炭素原子であり、Aは炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、Bはそれぞれ窒素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよいイソキノリル基（該イソキノリル基を構成するCH基の１つまたは２つは窒素原子に置き換えられてもよい。）であり、前記環状基Aは前記イソキノリル基の１-位に共有結合していることを特徴としている金属配位化合物を発光材料として用いることである。

より好ましくは全体として、下記一般式（３）で示されることを特徴とする金属配位化合物であって、

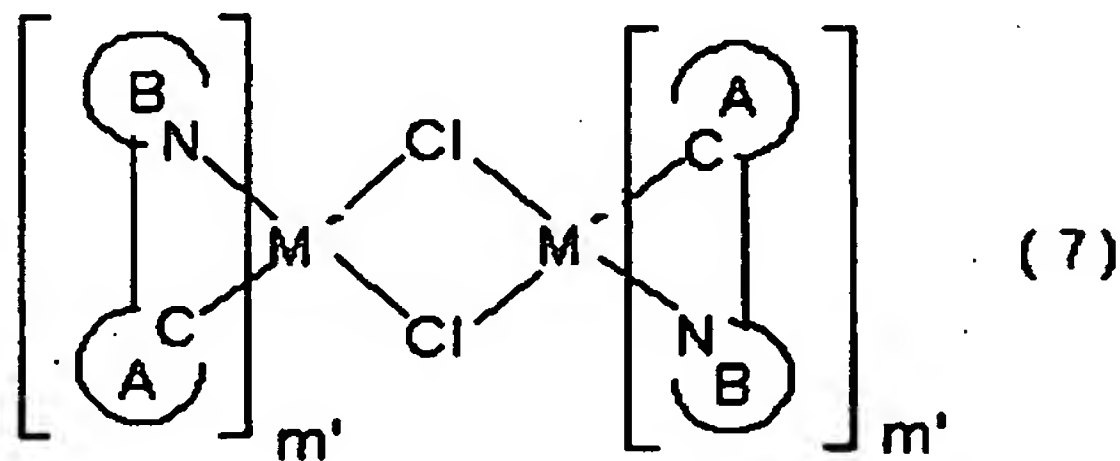


式中MはIr, Pt, RhまたはPdの金属原子であり、LおよびL'は互いに異なる二座配位子を示し、mは１または２または３であり、nは０または１または２である。ただし、m+nは２または３である。部

分構造  $ML'_n$  は下記一般式 (4) または (5) または (6) で示されることを特徴とする金属配位化合物を発光材料として用いる。



また本発明では、全体として下記一般式 (7) で示される金属配位化合物をも発光材料として用いる。



ここで Cl は塩素原子を意味し、 $M'$  はイリジウム Ir またはロジウム Rh であり、 $m'$  は 2 である。

さらに本発明によれば、上記した新規金属配位化合物を有機発光材料として用いた高性能な有機発光素子ならびに表示装置が提供される。

本発明の好ましい態様は以下の通りである。

前記一般式 (3) において  $n$  が 0 である金属配位化合物。

前記環状基 A および環状基 A' が、それぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、ナフチル基、チエニル基、フルオレニル基、チアナフチル基、アセナフチル基、アントラニル基、フェナンスレニル基、ピレニル基、またはカルバゾリル基(該芳香環基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれる金属配位化合物。



前記環状基 A および A' である芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基、2-ナフチル基、2-チエニル基、2-フルオレニル基、2-チアナフチル基、2-アントラニル基、2-フェナンスレニル基、2-ピレニル基、または 3-カルバゾリル基(該芳香環基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれる金属配位化合物。

前記芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基である金属配位化合物。

置換基を有していてもよいフェニル基の環状基 B に結合している位置(1-位)の隣(6-位)が水素原子である金属配位化合物。

前記環状基 B' および環状基 B'' が、それぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるイソキノリル基、キノリル基、2-アザアントラニル基、フェナンスリジニル基、ピリジル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、またはベンゾチアゾリル基(該芳香環基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれる金属配位化合物。

前記環状基 B' および B'' である芳香環基が、置換基を有していてもよいイソキノリル基またはピリジル基(該芳香環基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれる金属配位化合物。

前記一般式(4)において環状基 B' が置換基を有してもよいイソキノリル基である金属配位化合物。

前記環状基 A、A'、B、B' および B'' が、それぞれ無置換であるか、あるいはハロゲン原子もしくは、炭素原子数 1 から 20 の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の 1 つもしくは隣接しない 2 つ以上のメチレン基は -O-、-S-、-CO-、-CH=CH-、-

5 C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価の芳香環基（該置換基はハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）を示す。）で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）から選ばれる置換基を有する金属配位化合物。

10 前記一般式（7）において環状基Aが、置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、ナフチル基、チエニル基、フルオレニル基、チアナフチル基、アセナフチル基、アントラニル基、フェナンスレニル基、ピレニル基、またはカルバゾリル基（該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。）から選ばれる金属配位化合物。

15 前記芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基、2-ナフチル基、2-チエニル基、2-フルオレニル基、2-チアナフチル基、2-アントラニル基、2-フェナンスレニル基、2-ピレニル基、または3-カルバゾリル基（該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。）から選ばれる金属配位化合物。

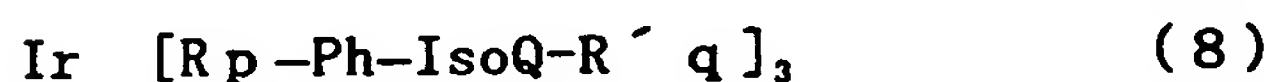
20 芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基である金属配位化合物。

置換基を有していてもよいフェニル基の環状基Bに結合している位置（1-位）の隣（6-位）が水素原子である金属配位化合物。

25 前記一般式（7）において環状基AおよびBが、それぞれ無置換であるか、あるいはハロゲン原子、もしくは炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない

2つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい。2価の芳香環基（該置換基はハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は $-O-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）を示す。）で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）から選ばれる置換基を有する金属配位化合物。

- 5 前記一般式（1）において、Mがイリジウムである金属配位化合物。  
 前記一般式（7）において、Mがイリジウムである金属配位化合物。  
 前記一般式（2）で示される部分構造MLを持つ金属配位化合物であって、下記一般式（8）で示される金属配位化合物。



- 15 [前記Irはイリジウム、部分構造Ph-IsoQは（1-フェニルイソキノリル）基、置換基R及び置換基R'は水素またはフッ素、または直鎖または分岐のアルキル基（該アルキル基は $C_nH_{2n+1}-$ で表され、HはFに、隣接しないメチレン基は酸素に置き換わっても良く、nは1から20の整数を表す）を示し、p及びqはそれぞれ前記フェニル基及び前記イソキノリル基に結合した置換基RおよびR'の数を示し、1以上の整数を示し、前記Phの2-位の炭素原子とIsoQの窒素原子がIrと配位結合をしている。]

- 20 前記一般式（8）において部分構造Rp-Ph-が（4-アルキルフェニル）基であり、置換基R'が水素である金属配位化合物。  
 25 前記一般式（8）において置換基Rが水素であり、R'qが1個の4-または5-位に置換したフルオロ基またはトリフルオロメチル基である

金属配位化合物。

前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (5-フルオロフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

- 5 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (4-フルオロフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基またはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

- 10 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (3,5-ジフルオロフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (3,4,5-トリフルオロフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

- 15 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (4-トリフルオロメチルフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

- 20 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (5-トリフルオロメチルフェニル) 基であり、 $R^q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

- 25 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (1-(3,4,5,6-テトラフルオロメチル)フェニル) 基であり、 $R^q$  において、 $q$  は 1 または 6 であり、 $R^q$  は水素、または 4-もしくは 5-位に置換したトリフルオロメチル基、または 3, 4, 5, 6, 7, 8-ヘキサフルオロ基

である金属配位化合物。

前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (4-アルキルフェニル) 基 (該アルキル基は炭素数 1 から 6 までの直鎖状または分岐状のアルキル基を表す) であり、 $R'_q$  は水素である金属配位化合物。

5 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (4-アルコキシフェニル) 基 (該アルコキシ基は炭素数 1 から 6 までの直鎖状または分岐状アルコキシ基を表す) であり、 $R'_q$  は水素である金属配位化合物。

10 前記一般式 (8) において部分構造  $R_p-Ph-$  が (4-トリフルオロメチルオキシフェニル) 基であり、 $R'_q$  が 1 個の水素、または 4-もしくは 5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基である金属配位化合物。

前記一般式 (3) で表される金属配位化合物であって、下記一般式 (9) で示される金属配位化合物。



15 ここで Ir はイリジウムを表す。

前記一般式 (9) で示される金属配位化合物であって、  
前記  $L_n$  は一般式 [4-アルキルフェニルイソキノリン]<sub>2</sub> (ここで前記アルキル基は  $C_nH_{2n+1}$  で表され、n は 1 から 8 までの整数を示す。) で表され、前記  $L'_n$  は、[1-フェニルイソキノリン]である金属配位化合物。

20 前記一般式 (9) で示される金属配位化合物であって、  
前記  $L_n$  は一般式 [1-フェニルイソキノリン]<sub>2</sub> で表され、  
前記  $L'_n$  は、[4-アルキルフェニルイソキノリン] (ここでアルキル基の炭素数は 1 から 8) である金属配位化合物。

25 前記一般式 (1) において、置換基を有してもよいイソキノリン基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つが窒素原子に置き換えられている金属配位化合物。

前記一般式（７）において、置換基を有してもよいイソキノリン基を構成するＣＨ基の１つまたは２つが窒素原子に置き換えられている金属配位化合物。

5 基体上に設けられた一对の電極間に、少なくとも一種の有機化合物を含む発光部を備える有機発光素子であって、前記有機化合物が前記請求項１に記載の一般式（１）で示される部分構造を少なくとも１つ有する金属配位化合物を含む有機発光素子。

前記有機化合物が下記一般式（３）で示される構造を有する金属配位化合物を含む有機発光素子。

10 前記有機化合物が下記一般式（８）で示される構造を有する金属配位化合物を含む有機発光素子。

前記有機化合物が下記一般式（９）で示される構造を有する金属配位化合物を含む有機発光素子。

15 前記電極間に電圧を印加することにより燐光を発光する有機発光素子。  
前記燐光の発光色が赤である有機発光素子。

前記の有機発光素子と、前記有機発光素子に電気信号を供給する手段とを具備した画像表示装置。

#### [図面の簡単な説明]

図１は本発明の発光素子の一例を示す図である。

20 図２は実施例８の単純マトリクス型有機ＥＬ素子を示す図である。

図３は実施例８の駆動信号を示す図である。

図４はＥＬ素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一例を模式的に示した図である。

図５は実施例２７の素子構成の電圧-効率-輝度特性を示す図である。

25 図６は実施例２７の素子構成の外部量子効率特性を示す図である。

図７は１-フェニルイソキノリンの重クロロホルム溶液の<sup>1</sup>H-NMRス



ペクトル。

図 8 は トリス (1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) イリジウム (III) の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

5 図 9 は 1-(4-メチルフェニル)イソキノリンの重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

図 10 は テトラキス [1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (μ-ジクロロ) ジイリジウム (III) の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

10 図 11 は ビス [1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (アセチルアセトナト) イリジウム (III) の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

図 12 は トリス [1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] イリジウム (III) の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

15 図 13 は ビス [1-(4-n-オクチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (アセチルアセトナト) イリジウム (III) の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトル。

#### [発明を実施するための最良の形態]

本発明により形成される有機発光素子の基本的な素子構成の例を図 1 (a)、(b) および (c) に示す。

20 図 1 に示すように、一般に有機 EL 素子は透明基板 15 上に、50～200 nm の膜厚を持つ透明電極 14 と、複数層の有機膜層と、及びこれを挟持するように金属電極 11 が形成される。

25 図 1 (a) には、有機層が発光層 12 とホール輸送層 13 からなる例を示す。透明電極 14 としては、仕事関数が大きな ITO などが用いられ、透明電極 14 からホール輸送層 13 へホール注入しやすくしている。金属電極 11 には、アルミニウム、マグネシウムあるいはそれらを用い

た合金など、仕事関数の小さな金属材料を用い、有機層への電子注入を  
しやすくしている。

発光層 1 2 には、本発明の化合物を用いているが、ホール輸送層 1 3  
には、例えばトリフェニルジアミン誘導体、代表例としては前記  $\alpha$ -N  
5 PD など、電子供与性を有する材料も適宜用いることができる。

以上の構成した素子は電氣的整流性を示し、金属電極 1 1 を陰極に、  
透明電極 1 4 を陽極になるように電界を印加すると、金属電極 1 1 から  
電子が発光層 1 2 に注入され、透明電極 1 5 からはホールが注入される。

注入されたホールと電子は、発光層 1 2 内で再結合して励起子が生じ、  
10 発光する。この時ホール輸送層 1 3 は電子のブロッキング層の役割を果  
たし、発光層 1 2 とホール輸送層 1 3 の間の界面における再結合効率が  
上がり、発光効率が上がる。

さらに図 1 (b) の素子では、図 1 (a) の金属電極 1 1 と発光層 1  
2 の間に、電子輸送層 1 6 が設けられている。発光機能と、電子及びホ  
ール輸送機能とを分離して、より効果的なキャリアブロッキング構成に  
15 することで、発光効率を上げている。電子輸送層 1 6 としては、例えば  
オキサジアゾール誘導体などを用いることができる。

また図 1 (c) に示すように、陽極である透明電極 1 4 側から、ホー  
ル輸送層 1 3、発光層 1 2、励起子拡散防止層 1 7、電子輸送層 1 6、  
20 及び金属電極 1 1 からなる 4 層構成とすることも望ましい形態である。

本発明に用いる発光材料としては、前記一般式 (1) から (9) で示  
される金属配位化合物が最適で、600nm 付近の赤色領域で高効率に発光  
し、長い期間高輝度を保ち、通電劣化が小さいことが見いだされた。

本発明に用いた金属配位化合物は、りん光性発光をするものであり、  
25 最低励起状態が、3 重項状態の MLC T\* (Metal-to-Lig  
and charge transfer) 励起状態あるいは  $\pi$ - $\pi$ \*

励起状態であると考えられる。これらの状態から基底状態に遷移するときりん光発光が生じる。

#### 《測定方法》

5 以下に、本発明の発光材料を特徴付けるものとして本明細書に記載する特性ならびに物性値の測定方法を説明する。

##### (1) 燐光と蛍光の判定方法

10 燐光の判定方法は、酸素置換するかどうかで判定した。化合物をクロロホルムに溶解し、酸素置換した溶液と窒素置換した溶液に光照射して、フォトルミネッセンスを比較すると、酸素置換した溶液は化合物に由来する発光がほとんど見られないのに対し、窒素置換した溶液はフォトルミネッセンスが確認できることでりん光と判定できる。これに対し、蛍光の場合、酸素置換した溶液中でも化合物に由来する発光は消失しない。以下本発明の化合物については、特別の断りがない時は全てこの方法で燐光であることを確認している。

15 (2) りん光収率（すなわち標準試料の量子収率 $\Phi$  (ST) に対する目的試料の量子収率 $\Phi$  (sample) の比、即ち相対量子収率) は、次式で求められる。

$$\Phi(\text{sample}) / \Phi(\text{st}) = [\text{Sem}(\text{sample}) / \text{Iabs}(\text{sample})] / [\text{Sem}(\text{st}) / \text{Iabs}(\text{st})]$$

20  $\text{Iabs}(\text{st})$  : 標準試料の励起する波長での吸収係数

$\text{Sem}(\text{st})$  : 同じ波長で励起した時の発光スペクトル面積強度

$\text{Iabs}(\text{sample})$  : 目的化合物の励起する波長での吸収係数

$\text{Sem}(\text{sample})$  : 同じ波長で励起した時の発光スペクトル面積強度

25 ここで言うりん光量子収率は  $\text{Ir}(\text{ppy})_3$  の $\Phi$ を標準の1とした相対評価で示している。

(3) 燐光寿命の測定方法は以下の通りである。

先ず化合物をクロロホルムに溶かし、石英基板上に約  $0.1\mu\text{m}$  の厚みでスピコートした。これを浜松ホトニクス社製の発光寿命測定装置を用い、室温で励起波長  $337\text{nm}$  の窒素レーザー光をパルス照射した。励起パルスが終わった後の発光強度の減衰時間を測定した。

- 5 初期の発光強度を  $I_0$  したとき、 $t$  秒後の発光強度  $I$  は、発光寿命  $\tau$  を用いて以下の式で定義される。

$$I = I_0 \cdot \exp(-t/\tau)$$

- すなわち、発光寿命  $\tau$  は、発光強度  $I$  が初期値  $I_0$  の  $1/e$  ( $I/I_0 = e^{-1}$ 、 $e$  は自然対数の底) に減衰するまでの時間を意味する。発光寿命が  $80\text{ns}$  以上、特に  $100\text{ns}$  以上であることは、りん光であることの第二の判定条件である。(これに対し、蛍光の発光寿命は、数十  $\text{ns}$  とより短い。)
- 10

- 本発明の発光材料のりん光発光量子収率は、 $0.15$  から  $0.9$  と高い値が得られ、りん光寿命は  $0.1 \sim 10\mu\text{sec}$  と短寿命であった。りん光寿命が短いことは、EL素子にしたときにエネルギー失括が少なく、発光効率を高めるための1つの条件となる。すなわち、りん光寿命が長いと、発光待ち状態の3重項励起状態の分子が多くなるために、失活過程が発生しやすくなり、特に高電流密度時に発光効率が低下すると言う問題があった。本発明の材料は、燐光寿命としては比較的短いために高いりん光発光量子収率を有し、EL素子の発光材料に適した材料である。本発明者らはこの原因をさらに次のように考えている。
- 15
- 20

- 一般に発光物質の一重項基底状態から励起三重項状態への遷移に伴う光吸収スペクトルのピークと、発光スペクトルの最大波長ピークの差はストークスシフトと呼ばれている。このピーク波長の違いが起きる原因は、三重項励起子が他の基底状態のエネルギー準位の影響を受けて、そのエネルギー状態を変化させることによるものと考えている。このエネ
- 25

ルギー状態の変化量が前記ストークスシフト量に関係しており、このシフト量が大きいと、一般に最大発光強度が低下し、また発光スペクトルが広がり発光色の単色性が悪くなる。この影響は特に前記一重項から三重項への遷移幅が短い赤色領域において大きく現れる。

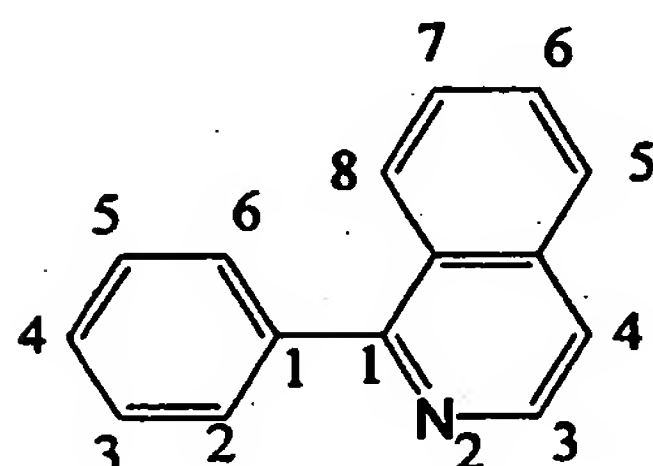
- 5       例えば本発明のイソキノリン系イリジウム錯体であるトリス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (後記表1から23中の例示化合物No. 1、略号: Ir(PiQ)<sub>3</sub>)、トリス[1-(2-チエニル)イソキノリン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 24、略号: Ir(tiQ)<sub>3</sub>)、トリス[1-(9, 9-ジメチルフルオレン-2-イル)イソキノリン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物No. 28、略号: Ir(FliQ)<sub>3</sub>) のストークスシフト量はそれぞれ 37nm、55nm、33nm であり、  
10       相対量子収率はそれぞれ 0.66、0.43、0.48 であった。

- 一方、非イソキノリン系の赤発光材料であるトリス[1-(チアナフテン-2-イル)ピリジン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III) (略号: Ir(BtPy)<sub>3</sub>)、  
15       トリス[1-(チアナフテン-2-イル)-4-トリフルオロメチルピリジン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III) (略号: Ir(Bt<sub>5</sub>CF<sub>3</sub>Py)<sub>3</sub>) のストークスシフト量はそれぞれ 132nm、85nm であり、本願化合物に比べると著しくストークスシフトが長くなっており、相対量子収率は 0.29、0.12 で本発明化合物に比べて小さい値である。

- 20       これら非イソキノリン系の赤発光材料も、従来にはない高い量子収率を示すものの、本発明のイソキノリン系イリジウム錯体のようにストークスシフトが少ないものは、更に量子収率が高い傾向にある。ストークスシフトが小さくなることはエネルギー幅射の速度定数を大きくして、  
      燐光寿命を小さくでき、そのゆえに発光収率が大きくなると考えられる。  
25       以上からイソキノリン骨格の導入によりストークスシフトを小さくでき、  
      発光量子収率を高め、さらに単色性を良くできると考えている。

# 《化合物の命名および構造表現》

ここで本発明の金属配位化合物の構造の明示のしかたおよびその基礎となる原子の位置番号の付け方を  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  (例示化合物 No. 1) を例にして説明しておく。この金属配位化合物の配位子 1-フェニルイソキノリンの位置番号は次に示すように付与される。



したがって、3個の 1-フェニルイソキノリンがフェニル基の 2-位の炭素原子とイソキノリン環の窒素原子でイリジウムに配位している  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  はトリス(1-フェニルイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)イリジウム(III)と命名される。

上述したように、 $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  は高い量子収率を示すが、この  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  に置換基を付与したものが溶液中ないし固相膜中で更に高い量子収率を示すことが判明した。例えば、配位子の基本骨格の 1-フェニルイソキノリンのフェニル基の 4-位にアルキル置換基を付与したトリス[1-(4-アルキルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N]イリジウム(III)は、相対量子収率(トルエン希薄溶液中の  $\text{Ir}(\text{ppy})_3$  の量子収率を 1 とした量子収率)が高くなる。これらはアルキル置換基の種類に応じて次のような相対量子収率を持つことが分かった。置換基の炭素鎖が 4 以上で顕著な量子収率の増加を示している。

(1)  $-\text{CH}_3=0.65$ ;

(2)  $-\text{C}(\text{CH}_3)_3=0.7$

(3)  $-\text{C}_4\text{H}_9=0.82$



(4)  $-\text{C}_6\text{H}_{13}=0.88$

(5)  $-\text{C}_8\text{H}_{17}=0.75$

このことから、前記骨格に置換基を導入して分子間相互作用を弱めることにより、発光量子収率の増加に効果があることがわかる。

- 5 他方、素子作成にタングステンボートを用いた抵抗加熱蒸着を用いる場合、分子量 1000 未満の材料が、低電流・高レートで蒸着できるなど素子作成のプロセス上適している。

上記アルキル鎖を付加したイリジウム錯体は、素子形成時の蒸着温度が高くなる傾向がある。これらアルキル置換された  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  の全体の  
10 分子量は、アルキル置換基の種類に応じて次のとおりになる。

(1)  $-\text{CH}_3 = 847$ ;

(2)  $-\text{C}(\text{CH}_3)_3 = 973$

(3)  $-\text{C}_4\text{H}_9 = 973$

(4)  $-\text{C}_6\text{H}_{13} = 1058$

15 (5)  $-\text{C}_8\text{H}_{17} = 1141$

これら材料の  $10^{-4}\text{Pa}$  でのタングステンボートを用いた抵抗加熱蒸着時の必要電流量を測定したところ、以下の通りとなった。

(1)  $-\text{CH}_3 = 5.8$  アンペア;

(2)  $-\text{C}(\text{CH}_3)_3 = 6.1$  アンペア;

20 (3)  $-\text{C}_4\text{H}_9 = 6.1$  アンペア;

(4)  $-\text{C}_6\text{H}_{13} = 6.4$  アンペア;

(5)  $-\text{C}_8\text{H}_{17} = 6.7$  アンペア;

またフッ素原子やポリフッ素化アルキル基などで置換基した金属配位化合物の場合には、フッ素原子の影響で分子間相互作用を更に弱めること  
25 とができ、蒸着温度を下げる事ができるために、蒸着適性を損なわずに分子量の大きい金属配位化合物を発光材料に用いることができる点で優

れている。例えば1個のメチル基をトリフルオロメチル基に換えると、分子量は増加するが蒸着温度をおよそ1度以上低温度化することができる。

5       また、前記一般式(1)または(9)で示される型の構造を有する金属配位化合物にイソキノリン骨格を導入することにより発光波長を調節することができるが、特にイソキノリン骨格が1一位で環状基Aに結合している本発明の金属配位化合物の場合には、予想に以上に発光波長の長波長化(つまり赤色化)に有効であることがわかった。

10       一方、公知化合物であるテトラキス(2-フェニルピリジン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)などでは発光スペクトルがほとんど観察されないが、前記一般式(7)で示されるイソキノリン骨格を導入した金属配位化合物では強い発光スペクトルが観察された。このことから、前記一般式(7)で示される金属配位化合物もEL素子の発光材料として適していることがわかる。

15       また、本発明の金属配位化合物に電子吸引性の置換基や電子供与性の置換基を導入することにより発光波長の調節ができる。また、アルコキシ基やポリフッ素化アルキル基などの電子的効果が大きくて、且つ立体的に嵩高い置換基の導入により、発光波長の調節と分子間相互作用に由来する濃度消光の抑制が同時に可能となる。また、アルキル基などの電  
20       子的効果が小さいが立体的に嵩高い置換基の導入は、発光波長を変化させないで濃度消光を抑制できると考えられる。

25       また、前記一般式(1)または(9)で示される金属配位化合物のイソキノリン環を構成するCH基の1つまたは2つを窒素原子に置き換える事により、置換基を導入することなしに発光波長を調節することもできる。

以上のような観点からも、本発明の金属配位化合物は有機EL素子の

発光材料として適している。

また、有機EL素子の構成有機材料には、材料の熱的安定性が重要である。それは、素子作成時の生産安定性や、通電動作時の素子安定性に強く影響する。有機EL素子を作成するとき、作成プロセスとしては、  
5 真空蒸着やスピコート、インクジェットによるプロセスが考えられる。特に、真空蒸着法では、抵抗加熱により有機材料を昇華あるいは蒸発によって飛ばして基板に堆積させるため、高温にさらされる時間がある。そのため、構成材料の熱的安定性は非常に重要である。

また、素子に通電して発光させる際においても、高電流が流れるため、  
10 局所的にジュール熱が発生する。構成材料の熱的安定性が低い場合、この熱による温度上昇による素子劣化の因子になりうる。一例を示すと、上記  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  と [ビス(1-フェニルイソキノリン- $\text{C}^2, \text{N}$ )(アセチルアセトナト)イリジウム(III)] (例示化合物 No. 42、略号：  
15  $\text{Ir}(\text{PiQ})_2\text{acac}$ ) を比較した場合、窒素フロー下で分解温度を測定すると、 $380^\circ\text{C}$  と  $340^\circ\text{C}$  と分解温度に差がある。 $\text{Ir}(\text{PiQ})_2\text{acac}$  を蒸着すると、ある蒸着条件では蒸着室内での分解が確認されるが、同じ条件で  
20  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  は分解が確認されない。種々の蒸着条件下で  $\text{Ir}(\text{PiQ})_2\text{acac}$  の分解の度合いを測定すると、蒸着スピードや蒸着時の真空度などの上限が低く、言い換えれば、大量生産の際の生産マージンが小さい。従って、  
材料の熱的安定性は生産性に大きな影響を与える。

また、分解のない条件で、真空蒸着によりEL素子を作成し、通電して上記2つの発光材料を用いた素子の輝度劣化の比較実験を行った。例えば初期輝度  $5000\text{cd}/\text{m}^2$  の輝度で発光する条件で通電を開始すると、その輝度半減時間は、 $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  と  $\text{Ir}(\text{PiQ})_2\text{acac}$  に対し 3 : 1 程度であり、  
25  $\text{Ir}(\text{PiQ})_3$  の方が輝度半減時間が長く通電に対して安定している。このように、構成材料の熱的安定性が、生産安定性・素子の安定性を決定して

いる因子であり、熱的安定性が高い材料を用いることが望ましい。

また、本発明の配位子には、本発明の特徴であるイソキノリン骨格が導入されたことによって、分子構造がより剛直になり熱失活の原因となる励起会合体形成の抑制が可能になって、分子運動によるエネルギー失活が抑制されることが考えられる。また、消光過程が減少したりすることにより素子特性が向上したものと考えられる。実際に、通電試験においても本発明の発光材料を用いると高い安定性をしめし、特に前記のイソキノリン骨格が1-位で環状基Aに結合している本発明の配位化合物は、すぐれた安定性を示した。

すなわち一般式(3)において $n=0$ であるトリス(1-置換イソキノリル)金属配位化合物は、一般に熱的安定性に優れるので好ましい。

従って、これまで発光波長が長波長(赤)で、且つ高い発光効率を示す化学的安定性の高い発光材料はなかったが、本発明の発光材料で実現することができる。

図1(a)、(b)および(c)に示すような層構成を有する本発明の高効率な発光素子は、省エネルギーや高輝度が必要な製品に応用が可能である。応用例としては表示装置・照明装置やプリンターの光源、液晶表示装置のバックライトなどが考えられる。表示装置としては、省エネルギーや高視認性・軽量なフラットパネルディスプレイが可能となる。また、プリンターの光源としては、現在広く用いられているレーザービームプリンタのレーザー光源部を、本発明の発光素子に置き換えることができる。照明装置やバックライトに関しては、本発明による省エネルギー効果が期待できる。

ディスプレイへの応用では、アクティブマトリクス方式である薄膜トランジスタ(TFTと略す)駆動回路を用いて駆動する方式が考えられる。以下、図4を参照して、本発明の素子において、アクティブマトリ

クス基板を用いた例について簡単に説明する。

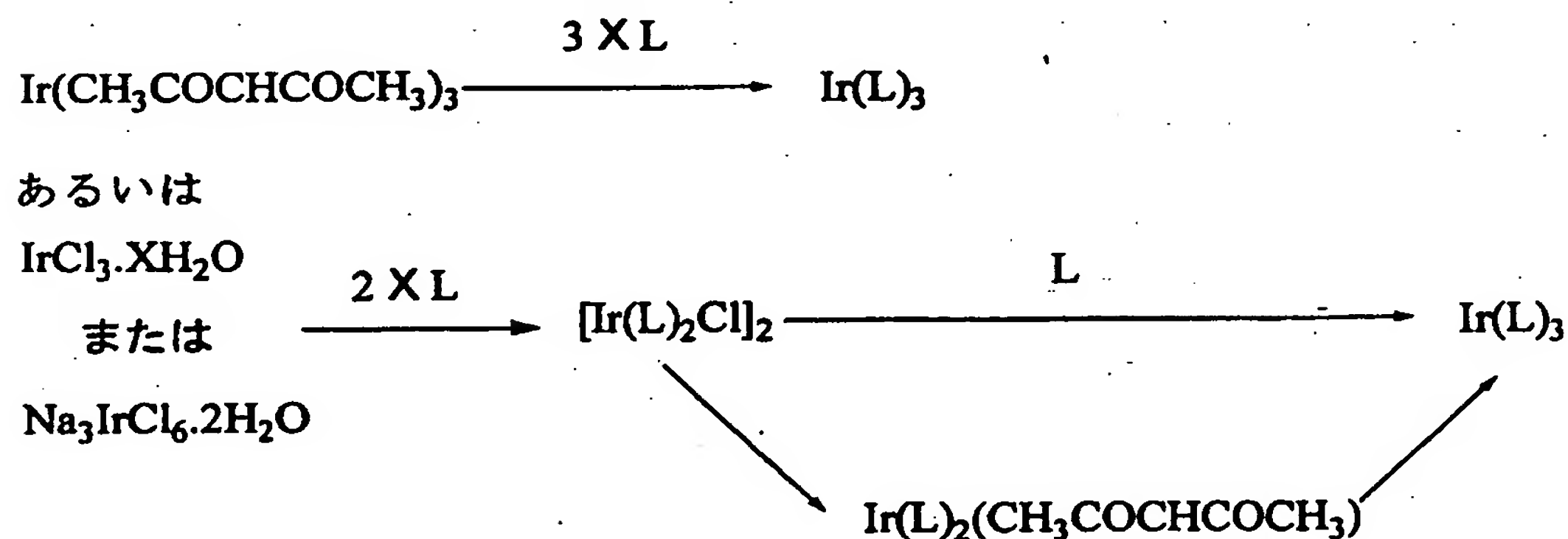
図4は、EL素子と駆動手段を備えたパネルの構成の一例を模式的に示したものである。パネルには、走査信号ドライバー、情報信号ドライバー、電流供給源が配置され、それぞれゲート選択線、情報信号線、電流供給線に接続される。ゲート選択線と情報信号線の交点には表示画素電極が配置される。走査信号ドライバーは、ゲート選択線G1、G2、G3... Gnを順次選択し、これに同期して情報信号ドライバーから画像信号が印加され、画像が表示される。

TFTのスイッチング素子に特に限定はなく、単結晶シリコン基板やMIM素子、a-Si型等でも容易に応用することができる。

上記ITO電極の上に多層あるいは単層の有機EL層/陰極層を順次積層し有機EL表示パネルを得ることができる。本発明の発光材料を発光層に用いた表示パネルを駆動することにより、良好な画質で、長時間表示にも安定な表示が可能になる。

#### 15 《合成経路の簡単な説明》

本発明で用いられる前記一般式(1)で示される金属配位化合物の合成経路をイリジウム配位化合物を例として示す。

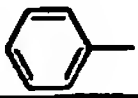
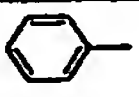


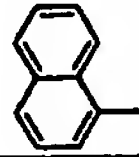
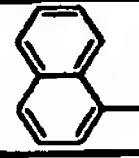
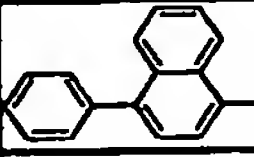
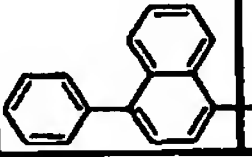


以下本発明に用いられる金属配位化合物の具体的な構造式を表1から

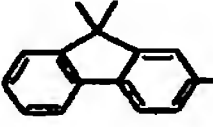
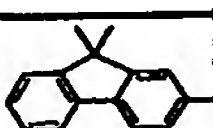

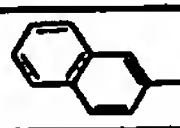
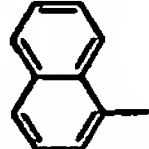
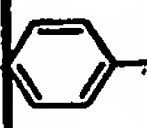
表 23 に示す。但し、これらは、代表例を例示しただけで、本発明は、これに限定されるものではない。表 1 ～ 表 23 に使用している P h ～ I q 10 は以下に示した、上記式 (3) (ならびにその部分構造を表わす式 (2)、および (4) ～ (6) 式) あるいは式 (7) 中の、部分構造を表している。また R<sub>1</sub> ～ R<sub>10</sub> は上記 P h から I q 10 中の置換基を示し、  
5 E、G および J は、式 (5) 中の置換基を示している。



【表1】

| No | M  | m | n | A  | B   | A  |  |   |    | B  |   |                 |    |    |     |
|----|----|---|---|----|-----|----|--|---|----|----|---|-----------------|----|----|-----|
|    |    |   |   |    |     | R1 | R2   | R3  | R4 | R5 | R6  | R7              | R8 | R9 | R10 |
| 1  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  | H   | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 2  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |    | H   | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 3  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  |    | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 4  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |    | H   | H  | H  |  | H               | H  | H  | H   |
| 5  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | CH <sub>3</sub>  | H   | H  | H  | H   | CF <sub>3</sub> | H  | H  | H   |
| 6  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  | CH <sub>3</sub>   | H  | H  | CF <sub>3</sub>   | H               | H  | H  | H   |
| 7  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |   | H   | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 8  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  |  | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 9  | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |  | H   | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |
| 10 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  |  | H  | H  | H   | H               | H  | H  | H   |

【表2】

| No | M  | m | n | A  | B   | A  |  |   |    | B  |   |    |    |    |     |
|----|----|---|---|----|-----|----|--|---|----|----|---|----|----|----|-----|
|    |    |   |   |    |     | R1 | R2   | R3  | R4 | R5 | R6  | R7 | R8 | R9 | R10 |
| 11 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | CF <sub>3</sub>  | H   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 12 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  | CF <sub>3</sub>   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 13 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |  | H   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 14 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | H  |  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 15 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |  | H   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 16 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |  | H   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 17 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  | OCH <sub>3</sub>   | H   | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H   |
| 18 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | H  |  | H   | H  | H  |  | H  | H  | H  | H   |

【表3】

| No | M  | m | n | A   | B   | A' | B' | E   | G   | J | A  |     |     |     | A' |    |    |    | B  |    |    |    |    | B'  |    |    |    |    |   |   |
|----|----|---|---|-----|-----|----|----|-----|-----|---|----|-----|-----|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|----|----|----|----|---|---|
|    |    |   |   |     |     |    |    |     |     |   | R1 | R2  | R3  | R4  | R1 | R2 | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8 | R9 | R10 | R5 | R6 | R7 | R8 |   |   |
| 19 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | CH3 | H   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 20 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | CH3 | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 21 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | CH3 | CH3 | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 22 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | F   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 23 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | H   | F   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 24 | Ir | 3 | 0 | Tn1 | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 25 | Ir | 3 | 0 | Tn3 | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 26 | Ir | 3 | 0 | Tn4 | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 27 | Ir | 3 | 0 | Np2 | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 28 | Ir | 3 | 0 | Fl  | Iq2 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 29 | Ir | 3 | 0 | Ph  | Iq5 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -  | -  | -  | -  | - | - |
| 30 | Ir | 3 | 0 | Fl  | Iq5 | -  | -  | -   | -   | - | H  | H   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -  | -  | -  | -  | - | - |
| 31 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | H   | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 32 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | CH3 | H   | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 33 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | CH3 | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 34 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | CH3 | CH3 | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 35 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | F   | H   | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 36 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | H   | F   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 37 | Ir | 2 | 1 | Tn1 | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 38 | Ir | 2 | 1 | Tn3 | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 39 | Ir | 2 | 1 | Tn4 | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 40 | Ir | 2 | 1 | Np2 | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 41 | Ir | 2 | 1 | Fl  | Iq2 | Ph | Pr | -   | -   | - | H  | H   | -   | -   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  | H | H |
| 42 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 43 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | CH3 | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 44 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | CH3 | H  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 45 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | CH3 | CH3 | H  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 46 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 47 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | F   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 48 | Ir | 2 | 1 | Tn1 | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 49 | Ir | 2 | 1 | Tn3 | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 50 | Ir | 2 | 1 | Tn4 | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 51 | Ir | 2 | 1 | Np2 | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 52 | Ir | 2 | 1 | Fl  | Iq2 | -  | -  | CH3 | CH3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 53 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | H   | H   | H  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 54 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | CH3 | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 55 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | H   | CH3 | H  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 56 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | CH3 | CH3 | H  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 57 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | F   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 58 | Ir | 2 | 1 | Ph  | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | H   | H   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 59 | Ir | 2 | 1 | Tn1 | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |
| 60 | Ir | 2 | 1 | Tn3 | Iq2 | -  | -  | CF3 | CF3 | H | H  | H   | H   | -   | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | -  | -  | - | - |

**【表4】**

[illegible]

【表5】

| No  | M  | m | n | A       | B  | A' | B' | E       | G       | J   | A  |      |     |    | A' |    |    |    | B  |    |    |    | B' |     |    |    |    |    |
|-----|----|---|---|---------|----|----|----|---------|---------|-----|----|------|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|----|----|----|----|
|     |    |   |   |         |    |    |    |         |         |     | R1 | R2   | R3  | R4 | R1 | R2 | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8 | R9 | R10 | R5 | R6 | R7 | R8 |
| 101 | Pt | 2 | 0 | Tn3 Ia2 | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | H    | -   | -  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 102 | Pt | 1 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | H    | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 103 | Pt | 1 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | H    | CH3 | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 104 | Pt | 1 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | CH3  | CH3 | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 105 | Pt | 1 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | F    | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 106 | Pd | 2 | 0 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 107 | Pd | 2 | 0 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | H    | CH3 | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 108 | Pd | 2 | 0 | Tn1 Ia2 | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | H    | -   | -  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 109 | Pd | 2 | 0 | Tn3 Ia2 | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | H    | -   | -  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 110 | Pd | 1 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | H    | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 111 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 112 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 113 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 114 | Ir | 2 | 1 | Tn1 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 115 | Ir | 2 | 1 | Tn1 Ia2 | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 116 | Ir | 2 | 1 | Tn1 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | C3H7    | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 117 | Ir | 2 | 1 | Tn2 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 118 | Ir | 2 | 1 | Tn2 Ia2 | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 119 | Ir | 2 | 1 | Tn2 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | C6H13   | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 120 | Ir | 2 | 1 | Tn3 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 121 | Ir | 2 | 1 | Tn3 Ia2 | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 122 | Ir | 2 | 1 | Tn3 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 123 | Ir | 2 | 1 | Tn4 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 124 | Ir | 2 | 1 | Tn4 Ia2 | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 125 | Ir | 2 | 1 | Tn4 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | C5H11   | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 126 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | CH3  | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 127 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | CH3  | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 128 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | CH3  | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 129 | Ir | 2 | 1 | Fl Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 130 | Ir | 2 | 1 | Fl Ia2  | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 131 | Ir | 2 | 1 | Fl Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 132 | Ir | 2 | 1 | Np1 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 133 | Ir | 2 | 1 | Np1 Ia2 | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 134 | Ir | 2 | 1 | Np1 Ia2 | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | H    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 135 | Ir | 3 | 0 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | -       | -       | -   | H  | C2H5 | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 136 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | Ph | Pr | -  | -       | -       | -   | H  | C2H5 | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H  | H  | H  | H  |
| 137 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | H  | C2H5 | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 138 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | H  | C2H5 | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 139 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | H  | C2H5 | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |
| 140 | Ir | 2 | 1 | Ph Ia2  | -  | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | H  | C2H5 | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -  | -  | -  | -  |

【表6-1】 【表6-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 141 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 142 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 143 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 144 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 145 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 146 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 147 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 148 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 149 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 150 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 151 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 152 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 153 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 154 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 155 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 156 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 157 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 158 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 159 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 160 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 161 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 162 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 163 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 164 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 165 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 166 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 167 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 168 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 169 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 170 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 171 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 172 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 173 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 174 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 175 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 176 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 177 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 178 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 179 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 180 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |







【表7-1】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | Q       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 181 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 182 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 183 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 184 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 185 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 186 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 187 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | Q(CH3)3 | Q(CH3)3 | H   | -   |
| 188 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 189 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 190 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 191 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 192 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 193 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 194 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 195 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 196 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 197 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 198 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | Q(CH3)3 | Q(CH3)3 | H   | -   |
| 199 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 200 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 201 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 202 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 203 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 204 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 205 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 206 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 207 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 208 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 209 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | Q(CH3)3 | Q(CH3)3 | H   | -   |
| 210 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 211 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 212 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 213 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 214 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 215 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 216 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 217 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 218 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 219 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 220 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |



【表8-1】 【表8-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 221 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 222 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 223 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 224 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 225 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 226 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 227 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 228 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 229 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 230 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 231 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 232 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 233 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 234 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 235 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 236 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 237 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 238 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 239 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | CH3     | H   | -   |
| 240 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 241 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 242 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C4H9    | CH3 | -   |
| 243 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | -       | -   | Pr  |
| 244 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 245 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 246 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 247 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 248 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 249 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 250 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 251 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 252 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 253 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 254 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 255 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 256 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 257 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 258 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 259 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 260 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |



【表9-1】 【表9-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B'  | E | G | J | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|-----|---|---|---|-----|
| 261 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr  | - | - | - | -   |
| 262 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 263 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 264 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 265 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 266 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 267 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 268 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 269 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 270 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 271 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 272 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 273 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 274 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 275 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 276 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr  | - | - | - | -   |
| 277 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 278 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 279 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   | - | - | - | -   |
| 280 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 281 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 282 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 283 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 284 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 285 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 286 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 287 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 288 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 289 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 290 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 291 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 292 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 293 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 294 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 295 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 296 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 297 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 298 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 299 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |
| 300 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 | - | - | - | -   |





【表10-1】  
【表10-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B'  |
|-----|----|---|---|----|-----|----|-----|
| 301 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 302 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 303 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 304 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 305 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 306 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 307 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 308 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 309 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 310 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 311 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 312 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 313 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 314 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 315 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 316 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 317 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 318 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 319 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 320 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 321 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 322 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 323 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 324 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 325 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 326 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 327 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 328 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -   |
| 329 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 330 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 331 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 332 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 333 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 334 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 335 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 336 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 337 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 338 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 339 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |
| 340 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | la2 |



【表11-1】 【表11-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B'  | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|-----|---------|---------|-----|-----|
| 341 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 342 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 343 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 344 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 345 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 346 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 347 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 348 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 349 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 350 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 351 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 352 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 353 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 354 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 355 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 356 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 357 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 358 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 359 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 360 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Iq2 | -       | -       | -   | -   |
| 361 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 362 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 363 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 364 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Pr  | -       | -       | -   | -   |
| 365 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 366 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 367 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | Q(CH3)3 | Q(CH3)3 | H   | -   |
| 368 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 369 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | Pr  |
| 370 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | Pr  |
| 371 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | Iq2 |
| 372 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 373 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 374 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | Ph | Pr  | -       | -       | -   | -   |
| 375 | Ir | 3 | 0 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | -   |
| 376 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 377 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | Q(CH3)3 | Q(CH3)3 | H   | -   |
| 378 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 379 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | Pr  |
| 380 | Ir | 2 | 1 | Ph | Iq2 | -  | -   | -       | -       | -   | Pr  |



【表12-1】 【表12-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 381 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 382 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 383 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 384 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 385 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 386 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 387 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 388 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | G(CH3)3 | G(CH3)3 | H   | -   |
| 389 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 390 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 391 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 392 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 393 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 394 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 395 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 396 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 397 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 398 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 399 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 400 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 401 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 402 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 403 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 404 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 405 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 406 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 407 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 408 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 409 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 410 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 411 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 412 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 413 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 414 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 415 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 416 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 417 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 418 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 419 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 420 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |







【表13-1】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 421 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 422 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 423 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 424 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 425 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 426 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 427 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 428 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 429 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 430 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 431 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | lg2 |
| 432 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 433 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 434 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 435 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 436 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 437 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 438 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 439 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 440 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 441 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 442 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | lg2 |
| 443 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 444 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 445 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 446 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 447 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 448 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 449 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 450 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 451 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 452 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 453 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | lg2 |
| 454 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 455 | Ir | 3 | 0 | Ph | lg2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 456 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 457 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 458 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 459 | Ir | 2 | 1 | Ph | lg2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |

【表13-2に続く】



表14-1A

【表14-2Aに続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B'  | E   | G    | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|-----|-----|------|-----|-----|
| 460 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | CH3 | C4H9 | CH3 | -   |
| 461 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | Pr  |
| 462 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | Pr  |
| 463 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | lq2 |
| 464 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 465 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 466 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 467 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr  | -   | -    | -   | -   |
| 468 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | CH3 | CH3  | H   | -   |
| 469 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 470 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 471 | Ir | 1 | 2 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 472 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | Pr  |
| 473 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | Pr  |
| 474 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | lq2 |
| 475 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 476 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 477 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 478 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 479 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 480 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 481 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | -   |
| 482 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | CH3 | C4H9 | CH3 | -   |
| 483 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 484 | Ir | 1 | 2 | Ph | lq2 | Ph | lq2 | -   | -    | -   | -   |
| 485 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -   | -   | -    | -   | lq2 |

【表14-1B】 【表14-2Bに続く】












| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 486 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 487 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 488 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 489 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 490 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 491 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 492 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 493 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 494 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 495 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 496 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 497 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 498 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 499 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 500 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 501 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 502 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 503 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 504 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 505 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 506 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 507 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 508 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 509 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |

【表14-2A】

| No  | A  |             |    |    | A' |       |    |    | B  |    |    |     |       |     | B' |    |    |    |    |     | B'' |    |      |    |    |     |
|-----|----|-------------|----|----|----|-------|----|----|----|----|----|-----|-------|-----|----|----|----|----|----|-----|-----|----|------|----|----|-----|
|     | R1 | R2          | R3 | R4 | R1 | R2    | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8  | R9    | R10 | R5 | R6 | R7 | R8 | R9 | R10 | R5  | R6 | R7   | R8 | R9 | R10 |
| 460 | F  | F           | F  | F  | -  | -     | -  | -  | F  | F  | F  | F   | F     | F   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 461 | F  | F           | F  | F  | -  | -     | -  | -  | F  | F  | F  | F   | F     | F   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | H    | H  | H  | -   |
| 462 | F  | F           | F  | F  | -  | -     | -  | -  | F  | F  | F  | F   | F     | F   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | C4H9 | H  | -  | -   |
| 463 | F  | F           | F  | F  | -  | -     | -  | -  | F  | F  | F  | F   | F     | F   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | H    | H  | H  | H   |
| 464 | H  | C2F5        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 465 | H  | C2F5        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | F   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 466 | H  | C3F7        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 467 | H  | C3F7        | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H  | H  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 468 | H  | C4F9        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 469 | H  | C3F7CH2CH2O | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 470 | H  | C3F7CH2CH2O | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 471 | H  | C3F7CH2CH2O | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 472 | H  | C5F11       | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | CH3  | H  | H  | -   |
| 473 | H  | C2F5        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | C4H9 | H  | -  | -   |
| 474 | H  | C3F7        | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | H    | H  | H  | H   |
| 475 | H  | C6F13       | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 476 | H  | C6F13       | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | CF3 | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 477 | H  | C6F13       | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | CF3   | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 478 | H  | C6F13       | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | F     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 479 | H  | C6F13       | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | F     | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 480 | H  | H           | H  | H  | H  | C6F13 | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 481 | H  | C6F13CH2O   | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 482 | H  | C18F37      | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 483 | H  | C6F13CH2O   | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 484 | H  | C6F13CH2O   | H  | H  | H  | H     | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H   | -   | -  | -    | -  | -  | -   |
| 485 | H  | C20F41      | H  | H  | -  | -     | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -  | -  | -  | -  | -   | -   | H  | H    | H  | H  | H   |

差替え用紙(規則26)

【表14-2B】

| No  | A  |   |     |    | A' |    |    |    | B  |    |    |     | B'    |     |    |    | B''  |    |    |     |
|-----|----|---|-----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-------|-----|----|----|------|----|----|-----|
|     | R1 | R2  | R3  | R4 | R1 | R2 | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8  | R9    | R10 | R5 | R6 | R7   | R8 | R9 | R10 |
| 486 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | -     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 487 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | F   | -     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 488 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 489 | H  |    | H   | H  | H  | H  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | H  | H  | -    | -  | -  | -   |
| 490 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 491 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 492 | H  |    | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 493 | H  |   | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 494 | H  |  | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | H  | H  | H    | H  | -  | -   |
| 495 | H  |  | H   | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | H  | H  | C2H5 | H  | H  | -   |
| 496 | H  |  | CH3 | H  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | H  | H  | H    | H  | H  | H   |
| 497 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 498 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | F   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 499 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 500 | H  | H   | F   | F  | H  | H  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | H  | H  | H    | -  | -  | -   |
| 501 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 502 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 503 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 504 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 505 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 506 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 507 | H  | H   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 508 | H  | CH3   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | CF3 | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 509 | H  | CH3   | F   | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | F   | H     | -   | -  | -  | -    | -  | -  | -   |

差替え用紙 (規則26)



【表15-1】 【表15-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 510 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 511 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 512 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 513 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 514 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 515 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 516 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 517 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 518 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 519 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 520 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 521 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 522 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 523 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 524 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 525 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 526 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 527 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 528 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 529 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 530 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 531 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 532 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 533 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 534 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 535 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 536 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 537 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 538 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 539 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 540 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | la2 |
| 541 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 542 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 543 | Ir | 3 | 0 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 544 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 545 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | F   | -   |
| 546 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 547 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 548 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 549 | Ir | 2 | 1 | Ph | la2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |

【表15-2】

| A   |    |         |    | A' |    |    |    | B  |    |    |    | B'  |       |     |    | B'' |    |    |    |    |      |    |    |     |
|-----|----|---------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|-----|-------|-----|----|-----|----|----|----|----|------|----|----|-----|
| No  | R1 | R2      | R3 | R4 | R1 | R2 | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8  | R9    | R10 | R5 | R6  | R7 | R8 | R5 | R6 | R7   | R8 | R9 | R10 |
| 510 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 511 | H  | CH3     | F  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H   | H  | H  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 512 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 513 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 514 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 515 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 516 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | -  | -   |
| 517 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | C4H9 | H  | -  | -   |
| 518 | H  | CH3     | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | H  | H   |
| 519 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 520 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | F   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 521 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 522 | H  | C2H5    | F  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H   | H  | H  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 523 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 524 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 525 | H  | C2H5    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 526 | H  | C3H7    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 527 | H  | C3H7    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | C4H9 | H  | -  | -   |
| 528 | H  | C3H7    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | C4H9 | H  | -  | -   |
| 529 | H  | C3H7    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | H  | H   |
| 530 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 531 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 532 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 533 | H  | C4H9    | F  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H   | H  | H  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 534 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 535 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 536 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 537 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 538 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | -  | -   |
| 539 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | CH3  | H  | -  | -   |
| 540 | H  | C4H9    | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | H  | H   |
| 541 | H  | C(CH3)3 | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | CF3 | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 542 | H  | C(CH3)3 | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | F   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 543 | H  | C(CH3)3 | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | C6H13 | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 544 | H  | C(CH3)3 | F  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | H  | H   | H  | H  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 545 | H  | C5H11   | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 546 | H  | C5H11   | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 547 | H  | C5H11   | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 548 | H  | C5H11   | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | -  | -  | -    | -  | -  | -   |
| 549 | H  | C5H11   | F  | F  | -  | -  | -  | -  | H  | H  | H  | H   | H     | H   | -  | -   | -  | -  | H  | H  | H    | H  | -  | -   |

【表16-1】  
【表16-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 550 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 551 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 552 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 553 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 554 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 555 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 556 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CF3     | CF3     | H   | -   |
| 557 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 558 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 559 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 560 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 561 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 562 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 563 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 564 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 565 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 566 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 567 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 568 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 569 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 570 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 571 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 572 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 573 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 574 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 575 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 576 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 577 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 578 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 579 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 580 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 581 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 582 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 583 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 584 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 585 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 586 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 587 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 588 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 589 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |



【表17-1】 【表17-2に続く】

| No  | M  | m | n | A  | B   | A' | B' | E       | G       | J   | B'' |
|-----|----|---|---|----|-----|----|----|---------|---------|-----|-----|
| 590 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 591 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 592 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 593 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 594 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 595 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 596 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 597 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 598 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 599 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 600 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 601 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 602 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 603 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 604 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 605 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 606 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 607 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 608 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq2 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 609 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq5 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 610 | Ir | 3 | 0 | Ph | lq5 | -  | -  | -       | -       | -   | -   |
| 611 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | Ph | Pr | -       | -       | -   | -   |
| 612 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | CH3     | CH3     | H   | -   |
| 613 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | CH3     | CH3     | CH3 | -   |
| 614 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | C(CH3)3 | C(CH3)3 | H   | -   |
| 615 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | CH3     | C4H9    | CH3 | -   |
| 616 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 617 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | -       | -       | -   | Pr  |
| 618 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq5 | -  | -  | -       | -       | -   | lq2 |
| 619 | Ir | 2 | 1 | Ph | lq2 | Ph | Pi | -       | -       | -   | -   |





【表18-1】

| No  | M  | m | n | A   | B   | A' | B'  | B'' |
|-----|----|---|---|-----|-----|----|-----|-----|
| 620 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Py1 | -   |
| 621 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Py2 | -   |
| 622 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Pz  | -   |
| 623 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Qn3 | -   |
| 624 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Xa  | -   |
| 625 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Bz  | -   |
| 626 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Bo  | -   |
| 627 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Oz  | -   |
| 628 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Sz  | -   |
| 629 | Ir | 2 | 1 | Tn4 | lq2 | Ph | Pr  | -   |
| 630 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | -  | -   | Pr  |
| 631 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | -  | -   | Pr  |
| 632 | Ir | 2 | 1 | Ph  | lq2 | -  | -   | lq2 |
| 633 | Rh | 3 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 634 | Rh | 3 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 635 | Rh | 3 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 636 | Rh | 2 | 1 | Ph  | lq2 | Ph | Pr  | -   |
| 637 | Pt | 2 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 638 | Pt | 2 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 639 | Pd | 2 | 0 | Ph  | lq2 | -  | -   | -   |
| 640 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 641 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 642 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 643 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 644 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 645 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 646 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 647 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 648 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 649 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq6 | -  | -   | -   |
| 650 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 651 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 652 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 653 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 654 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 655 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 656 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 657 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 658 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |
| 659 | Ir | 3 | 0 | Ph  | lq7 | -  | -   | -   |




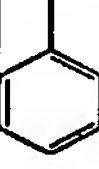
【表19】

| No  | M  | m' | A  | B   | A  |         |    |    |    | B  |    |    |    |     |   |
|-----|----|----|----|-----|----|---------|----|----|----|----|----|----|----|-----|---|
|     |    |    |    |     | R1 | R2      | R3 | R4 | R5 | R6 | R7 | R8 | R9 | R10 |   |
| 660 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | H       | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 661 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | CH3     | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 662 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C2H5    | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 663 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C3H7    | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 664 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C4H9    | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 665 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C(CH3)3 | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 666 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C5H11   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 667 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C6H13   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 668 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C7H15   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 669 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C8H17   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 670 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C9H19   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 671 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C10H21  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 672 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C11H23  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 673 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C12H25  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 674 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C13H27  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 675 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C14H29  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 676 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C15H31  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 677 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C16H33  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 678 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C17H35  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 679 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C18H37  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 680 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C19H39  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 681 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | C20H41  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 682 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | F  | H       | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 683 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | F       | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 684 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | H       | F  | H  | F  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 685 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | H       | H  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 686 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | F  | H       | F  | F  | H  | H  | H  | H  | H  | H   | H |
| 687 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | F       | F  | F  | H  | F  | H  | H  | H  | H   | H |
| 688 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | H  | F       | F  | F  | H  | F  | H  | H  | H  | H   | H |
| 689 | Ir | 2  | Ph | Iq2 | F  | F       | F  | F  | H  | F  | H  | H  | H  | H   | H |

【表20】

| No  | M  | m' | A  | B   | A   |        |     |     | B  |    |    |     |     |     |
|-----|----|----|----|-----|-----|--------|-----|-----|----|----|----|-----|-----|-----|
|     |    |    |    |     | R1  | R2     | R3  | R4  | R5 | R6 | R7 | R8  | R9  | R10 |
| 690 | Ir | 2  | Ph | lq2 | F   | F      | F   | F   | H  | H  | H  | CF3 | H   | H   |
| 691 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | CF3    | H   | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 692 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | CF3 | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 693 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | H   | CF3 | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 694 | Ir | 2  | Ph | lq2 | CF3 | H      | CF3 | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 695 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | CH3    | F   | F   | H  | H  | H  | H   | F   | H   |
| 696 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C2H5   | F   | F   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 697 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C3H7   | F   | F   | H  | H  | H  | H   | F   | H   |
| 698 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C4H9   | F   | F   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 699 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C5H11  | F   | F   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 700 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C6H13  | F   | F   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 701 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C12H25 | F   | F   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 702 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C15H31 | F   | F   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 703 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C20H41 | F   | F   | H  | H  | H  | F   | H   | H   |
| 704 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | H   | H   | H  | H  | H  | H   | F   | H   |
| 705 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | H   | H   | H  | H  | H  | CF3 | H   | H   |
| 706 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | H   | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 707 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | H      | H   | H   | F  | F  | F  | F   | F   | F   |
| 708 | Ir | 2  | Ph | lq2 | F   | F      | F   | F   | F  | F  | F  | F   | F   | F   |
| 709 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | CF3    | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 710 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C2F5   | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 711 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C3F7   | H   | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 712 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C4F9   | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 713 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C5F11  | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 714 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C6F13  | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 715 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C7F15  | H   | H   | H  | H  | H  | H   | CF3 | H   |
| 716 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C8F17  | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 717 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C10F21 | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 718 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C15F31 | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 719 | Ir | 2  | Ph | lq2 | H   | C15F31 | H   | H   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |

【表21】

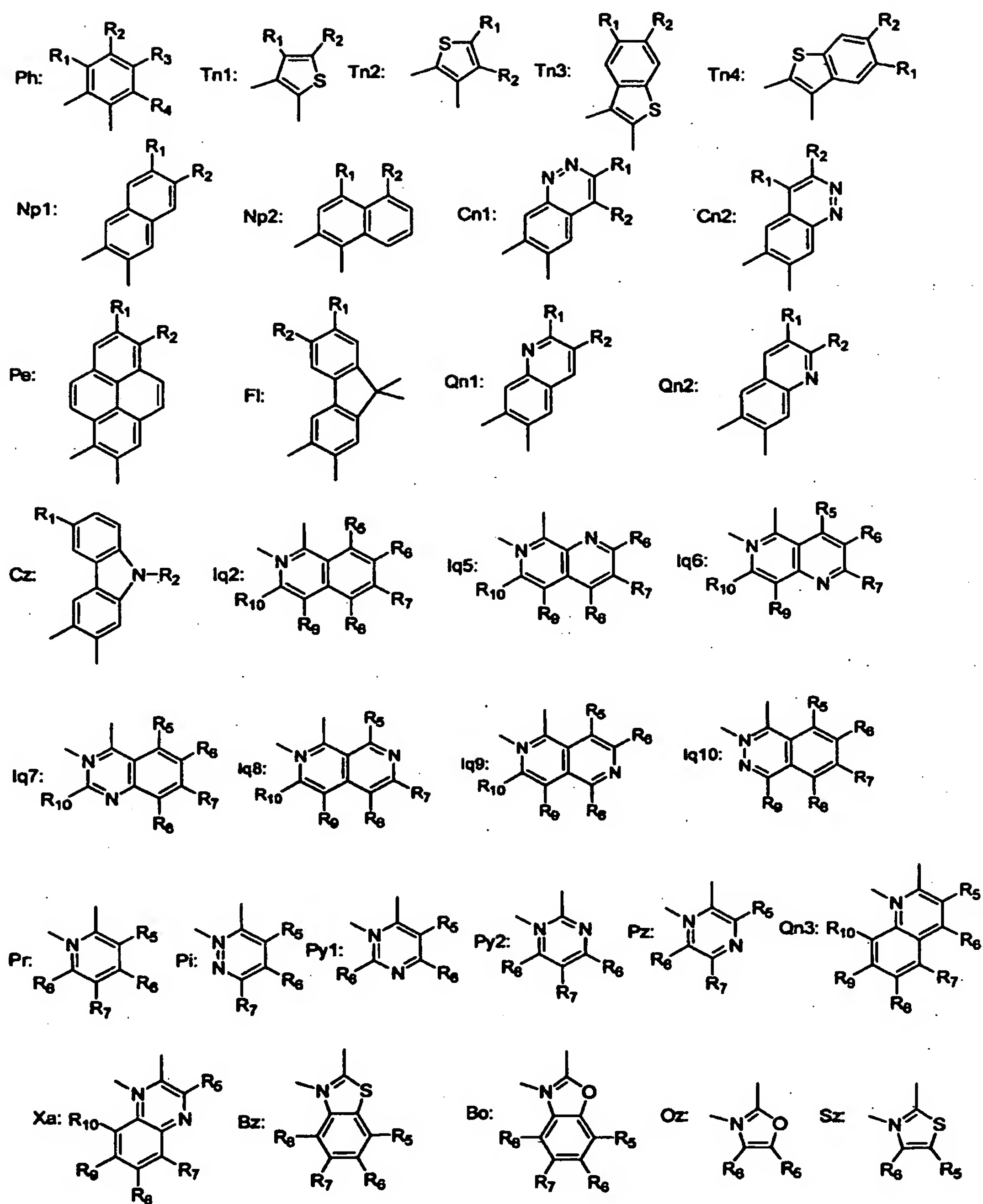
| No  | M  | m' | A   | B   | A  |   |   |    | B  |    |    |    |    |     |
|-----|----|----|-----|-----|----|---|---|----|----|----|----|----|----|-----|
|     |    |    |     |     | R1 | R2  | R3  | R4 | R5 | R6 | R7 | R8 | R9 | R10 |
| 720 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  |  | H   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 721 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | CH3   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 722 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   |  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 723 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C2H5  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 724 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C3H7  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 725 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C4H9  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 726 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C(CH3)3   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 727 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C5H11   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 728 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C6H13   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 729 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C7H15   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 730 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C8H17   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 731 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C9H19   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 732 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C10H21  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 733 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C11H23  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 734 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C12H25  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 735 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C15H31  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 736 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C18H37  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 737 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | H   | C20H41  | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 738 | Ir | 2  | Ph  | lq2 | H  | F   | CH3   | H  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 739 | Ir | 2  | Fl  | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 740 | Ir | 2  | Tn1 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 741 | Ir | 2  | Tn2 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 742 | Ir | 2  | Tn3 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 743 | Ir | 2  | Tn4 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 744 | Ir | 2  | Np1 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 745 | Ir | 2  | Np2 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 746 | Ir | 2  | Cn1 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 747 | Ir | 2  | Cn2 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 748 | Ir | 2  | Pe  | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 749 | Ir | 2  | Qn1 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |
| 750 | Ir | 2  | Qn2 | lq2 | H  | H   | -   | -  | H  | H  | H  | H  | H  | H   |

【表22】

| No  | M  | m' | A  | B   | A   |        |      |     |    | B  |    |     |     |     |
|-----|----|----|----|-----|-----|--------|------|-----|----|----|----|-----|-----|-----|
|     |    |    |    |     | R1  | R2     | R3   | R4  | R5 | R6 | R7 | R8  | R9  | R10 |
| 751 | Ir | 2  | Cz | lq2 | H   | C2H5   | -    | -   | H  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 752 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | H      | CF3  | H   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 753 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | H      | H    | CF3 | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 754 | Ir | 2  | Ph | lq5 | CF3 | H      | CF3  | H   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 755 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | H      | H    | H   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 756 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | CH3    | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 757 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C2H5   | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 758 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C3H7   | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 759 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C4H9   | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 760 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C5H11  | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 761 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C6H13  | F    | F   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 762 | Ir | 2  | Ph | lq5 | H   | C6F13  | H    | H   | -  | H  | H  | H   | H   | H   |
| 763 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | H      | H    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 764 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | H      | F    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 765 | Ir | 2  | Ph | lq6 | F   | H      | F    | H   | H  | H  | H  | -   | F   | H   |
| 766 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | CF3    | H    | H   | H  | H  | H  | -   | CF3 | H   |
| 767 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | CH3    | H    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 768 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | C4H9   | H    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 769 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | C3F7   | H    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 770 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | OC6H13 | C3H7 | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 771 | Ir | 2  | Ph | lq6 | F   | F      | F    | H   | H  | H  | H  | -   | CF3 | H   |
| 772 | Ir | 2  | Ph | lq6 | H   | OCF3   | H    | H   | H  | H  | H  | -   | H   | H   |
| 773 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | H      | H    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 774 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | H      | F    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 775 | Ir | 2  | Ph | lq7 | F   | H      | F    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 776 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | CF3    | H    | H   | H  | H  | H  | CF3 | -   | H   |
| 777 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | CH3    | H    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 778 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | C4H9   | H    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 779 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | C3F7   | H    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 780 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | OC6H13 | C3H7 | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |
| 781 | Ir | 2  | Ph | lq7 | F   | F      | F    | H   | H  | H  | H  | F   | -   | H   |
| 782 | Ir | 2  | Ph | lq7 | H   | OCF3   | H    | H   | H  | H  | H  | H   | -   | H   |







[実施例]

以下に実施例を挙げて本発明を具体的に説明する。

<実施例 1、2>

本実施例では、素子構成として、図 1 (c) に示す有機層が 4 層の素子 (有効表示面積:  $3 \text{ mm}^2$ ) を作成した。透明基板 15 として無アルカリガラス基板を用い、この上に透明電極 14 として  $100 \text{ nm}$  の酸化インジウム (ITO) をスパッタ法にて形成し、パターンニングした。この上にホール輸送層 13 として、前記構造式で表される  $\alpha$ -NPD を膜厚  $40 \text{ nm}$  真空蒸着した。その上に有機発光層 12 として、前記 CBP をホスト材料とし、所定の金属配位化合物を重量比 8 重量%になるように膜厚  $30 \text{ nm}$  で共蒸着した。さらに励起子拡散防止層 17 として、BCP を  $10 \text{ nm}$  真空蒸着した。次に電子輸送層 16 として、前記 Alq3 を  $10^{-4} \text{ Pa}$  の真空度で抵抗加熱蒸着を行ない、膜厚  $30 \text{ nm}$  の有機膜を得た。

この上に金属電極層 11 の下引き層として、AlLi 合金膜厚を  $15 \text{ nm}$  で配置した。さらに、 $100 \text{ nm}$  の膜厚のアルミニウム Al 膜を蒸着し、透明電極 14 と対向する電極面積が  $3 \text{ mm}^2$  になる形状でパターンニングした金属電極 11 を形成した。

配位化合物としては表 1 中の、例示化合物 No. 1 (実施例 1) および表 3 中の No. 28 (実施例 2) をそれぞれを用いた。

得られた EL 素子の特性としては、電流電圧特性をヒューレッドパッカー社製・微小電流計 4140B で測定し、発光輝度は、トプコン社製 BM7 で測定した。本実施例の各配位化合物に対応する素子はそれぞれ良好な整流性を示した。

電圧  $12 \text{ V}$  印加時に、本 EL 素子からの発光を確認した。発光はそれぞれ、

実施例 1 (化合物 No. 1) の素子:  $8000 \text{ cd/m}^2$

実施例 2 (化合物 No. 28) の素子 :  $3500 \text{ cd/m}^2$

であった。

これらの配位化合物 No. 1 および No. 28 の発光特性を知るために、溶液の発光スペクトルを測定した。分光蛍光光度計 (日立製 : F 4500) 5 500) 用い、配位化合物の濃度  $10^{-4} \text{ mol/l}$  のトルエン (またはクロロホルム) 溶液に 350 nm 前後の励起光を当てて発光スペクトルを測定した。発光スペクトルは、ほぼ電圧印加時の EL 素子のスペクトルの値とそれぞれ合致し、EL 素子の発光が配位化合物からの発光であることが確認された (後記実施例 7 および 8 参照)。

10 < 実施例 3 ~ 5、比較例 1 >

表 24 に示す発光材料 (例示化合物) を金属配位化合物として用いた以外は、実施例 1、2 と同様にして発光素子を製造した。比較例 1 では従来の発光材料の代表として前記 Ir (ppy)<sub>3</sub> を用いた。

ITO 電極を陽極、Al 電極を陰極として 12 ボルトの直流電圧を印 15 加して通電耐久試験を行ない、発光輝度が半減するまでの時間を計った。

測定の結果を表 24 に示すが、従来の発光材料を用いた素子より明らかに輝度半減時間が大きくなり、本発明の材料の安定性に由来した耐久性の高い素子を得ることができた。

表 24

|       | 発光材料 No.             | 輝度半減時間 (hrs) |
|-------|----------------------|--------------|
| 実施例 3 | 1                    | 1550         |
| 実施例 4 | 24                   | 1100         |
| 実施例 5 | 28                   | 1350         |
| 比較例 1 | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 350          |

20 < 実施例 6 >

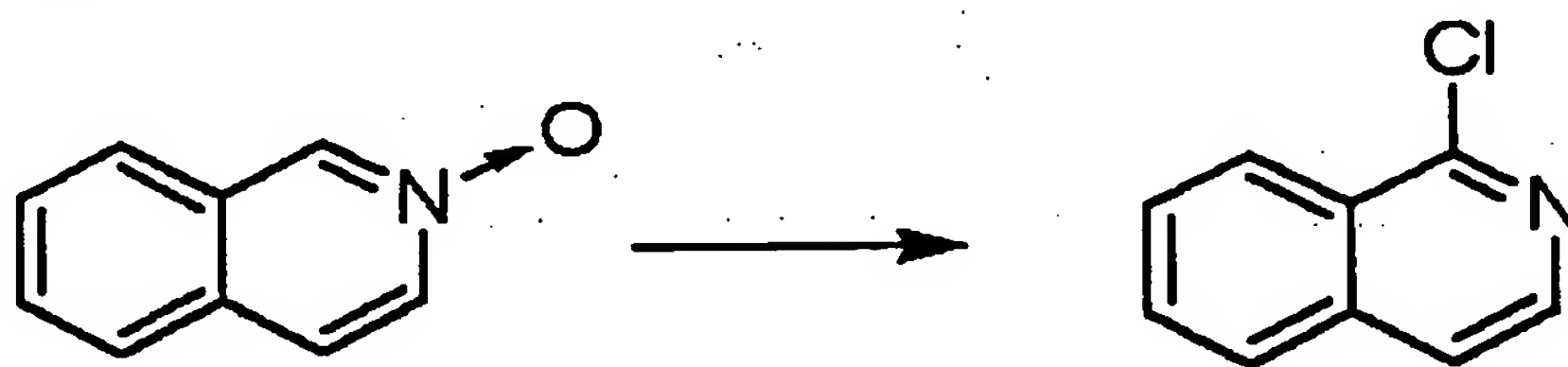
次の手順で図2に示す単純マトリクス型有機EL素子を作成した。

縦 100mm、横 100mm、厚さ 1.1mm のガラス基板 21 上に透明電極 22 (陽極側) として約 100nm 厚の ITO 膜をスパッタ法にて形成後、単純マトリクス電極として 100 $\mu$ m 幅の電極を間隔 40 $\mu$ m で 100 ラインをパターンニングした。つぎに実施例 1 と同様の条件で同じ有機材料を用いて 4 層から成る有機化合物層 23 を作成した。

続いてマスク蒸着にて、100 $\mu$ m 幅の電極を間隔 40 $\mu$ m で 100 ライン分の A1 電極 24 を、透明電極 22 と直交するように、真空度  $2.7 \times 10^{-3}$  Pa の条件で真空蒸着法にて成膜した。金属電極 (陰極) 24 は Al/Li 合金 (Li:1.3wt%) を膜厚 10nm、つづいて Al を 150nm の膜厚で積層して形成した。

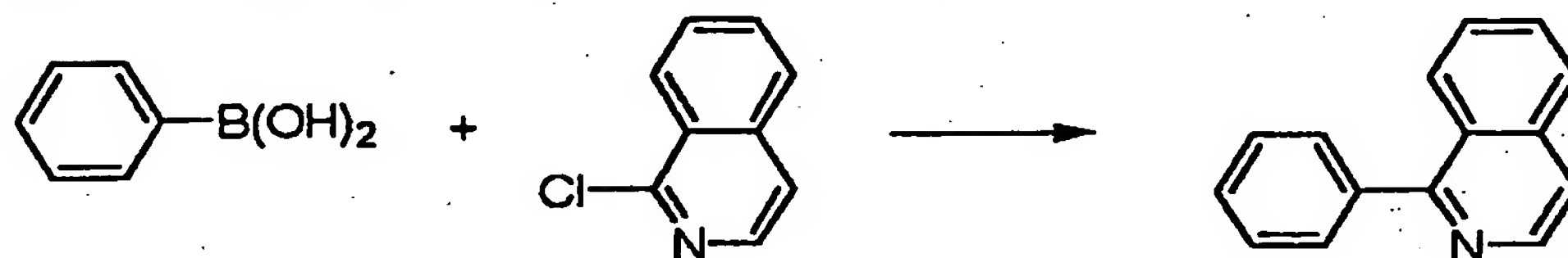
この 100 x 100 の単純マトリクス型有機EL素子を、窒素雰囲気で満たしたグローブボックス中にて、図3に示す 10ボルトの走査信号と  $\pm 3$  ボルトの情報信号を用いて、7ボルトから 13ボルトの電圧で、単純マトリクス駆動をおこなった。フレーム周波数 30Hz でインターレース駆動したところ、各々発光画像が確認できた。

<実施例7> (例示化合物 No. 1 の合成)



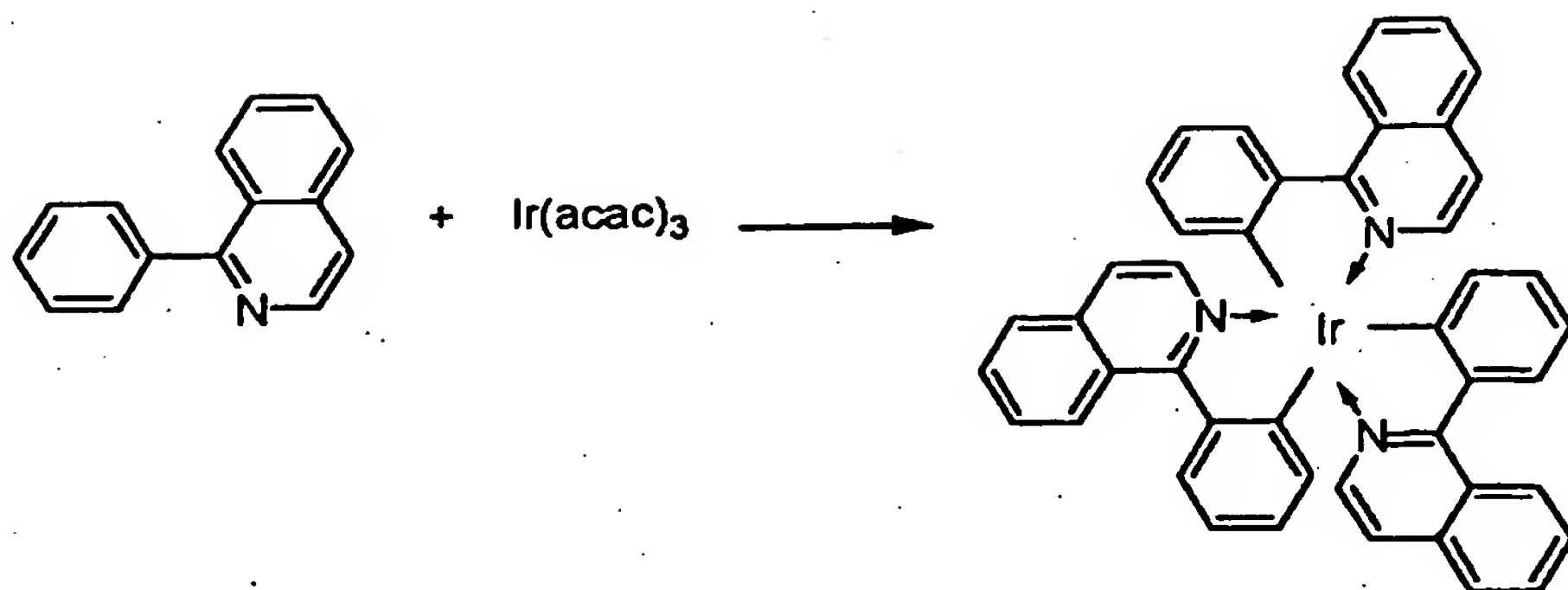
イソキノリンN-オキシド (東京化成製) 69.3 g (448 mmol)、クロロホルム 225 ml を 1 リットルの 3 口フラスコに入れて溶かし、氷冷攪拌下、内温を 15 ~ 20 $^{\circ}$ C に保ってオキシ塩化リン 219.6 g (1432 mmol) をゆっくり滴下した。その後昇温し、

3時間還流撹拌を行った。反応物を室温まで放冷し、氷水中に注入した。酢酸エチルで抽出し、有機層を中性になるまで水洗し、溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶離液：クロロホルム／ヘキサン：5／1）で精製し、1-クロロイソキノリンの白色結晶35.5g（収率44.9%）を得た。



100mlの3つ口フラスコにフェニルボロン酸（東京化成製）3.04g（24.9mmole）、1-クロロイソキノリン4.09g（25.0mmole）、トルエン25ml、エタノール12.5mlおよび2M-炭酸ナトリウム水溶液25mlを入れ、窒素気流下室温で撹拌しながらテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム（0）0.98g（0.85mmole）を加えた。その後、窒素気流下で8時間還流撹拌した。反応終了後、反応物を冷却して冷水およびトルエンを加えて抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥して溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶離液：クロロホルム／メタノール：10／1）で精製し、1-フェニルイソキノリン2.20g（収率43.0%）を得た。この化合物の重クロロホルム溶液の $^1\text{H-NMR}$ スペクトルを図7に示す。



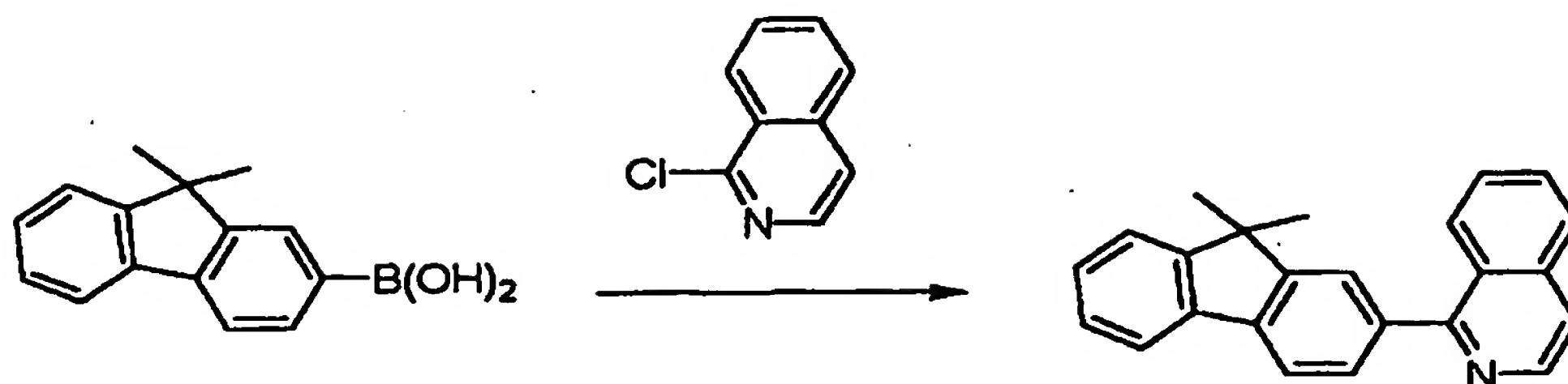


100 ml の 4 つ口フラスコにグリセロール 50 ml を入れ、窒素バ  
 プリングしながら 130～140℃ で 2 時間加熱攪拌した。グリセロール  
 を 100℃ まで放冷し、1-フェニルイソキノリン 1.03 g (5.  
 5 02 mmol)、イリジウム (III) アセチルアセトネート (スト  
 レム社製) 0.50 g (1.02 mmol) を入れ、窒素気流下 21  
 0℃ 付近で 7 時間加熱攪拌した。反応物を室温まで冷却して 1 N-塩酸  
 300 ml に注入し、沈殿物を濾取・水洗した。この沈殿物をクロロホルム  
 を溶離液としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、ト  
 10リス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III)の赤色粉末 0.  
 22 g (収率 26.8%) を得た。MALDI-TOF MS (マトリックス支援イ  
 オン化-飛行時間型質量分析) により、この化合物の M<sup>+</sup> (電子 1 個を  
 除いた対応陽イオン質量数) として 805.2 を確認した。

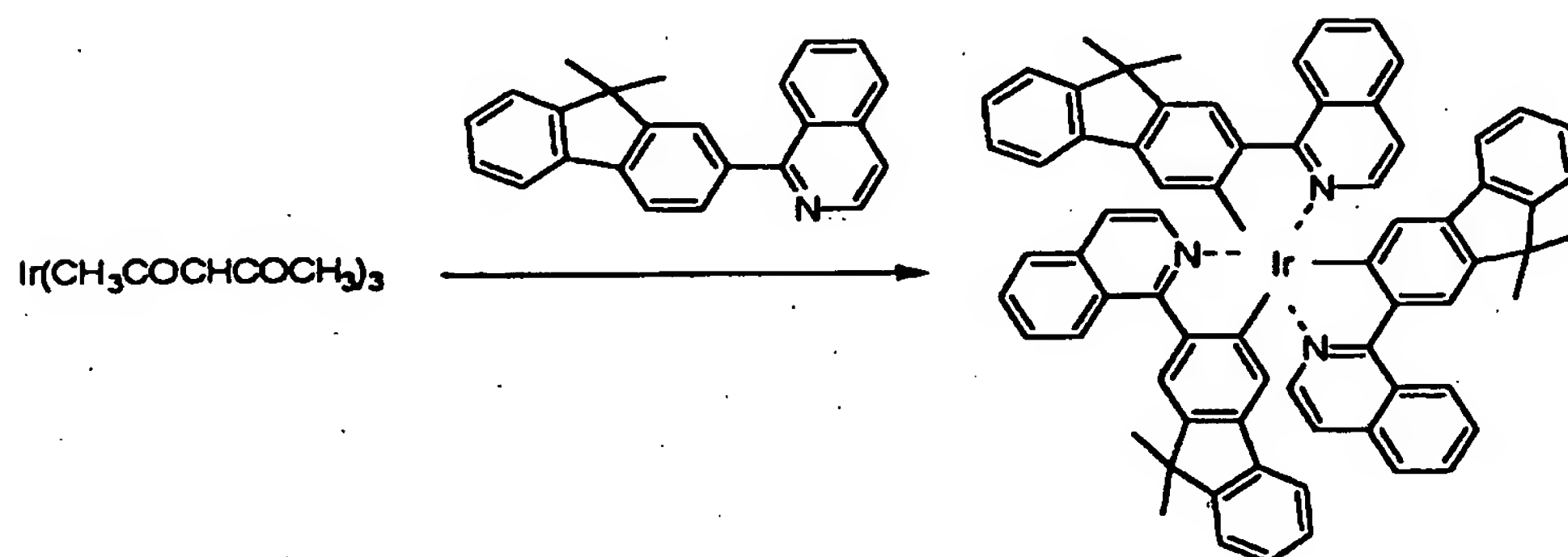
この化合物の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトルを図 8 に示す。  
 15 この化合物のクロロホルム溶液の発光スペクトルの λ<sub>max</sub> は 619  
 nm、量子収率は Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 としたとき 0.66 だった。

この化合物を用いて作成した実施例 1 の EL 素子に電圧を印加して λ<sub>max</sub> が 620 nm の赤色発光を確認した。

<実施例 8> (例示化合物 No. 28 の合成)



- 100 ml の3つ口フラスコに9, 9-ジメチルフルオレン-2-ボ  
 ロン酸2. 91 g (12. 2 mmol e)、1-クロロイソキノリン2.  
 00 g (12. 2 mmol e)、トルエン10 ml、, エタノール5 ml  
 5 および2 M-炭酸ナトリウム水溶液10 ml を入れ、窒素気流下室温で  
 攪拌しながらテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)  
 0. 44 g (0. 38 mmol e) を加えた。その後、窒素気流下で5  
 時間還流攪拌した。反応終了後、反応物を冷却して冷水および酢酸エチ  
 ルを加えて抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾  
 燥して溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマト(溶離  
 液: トルエン/酢酸エチル: 50/1) で精製し、1-(9, 9-ジメ  
 10 チルフルオレン-2-イル)イソキノリン2. 13 g (収率54.  
 2%) を得た。

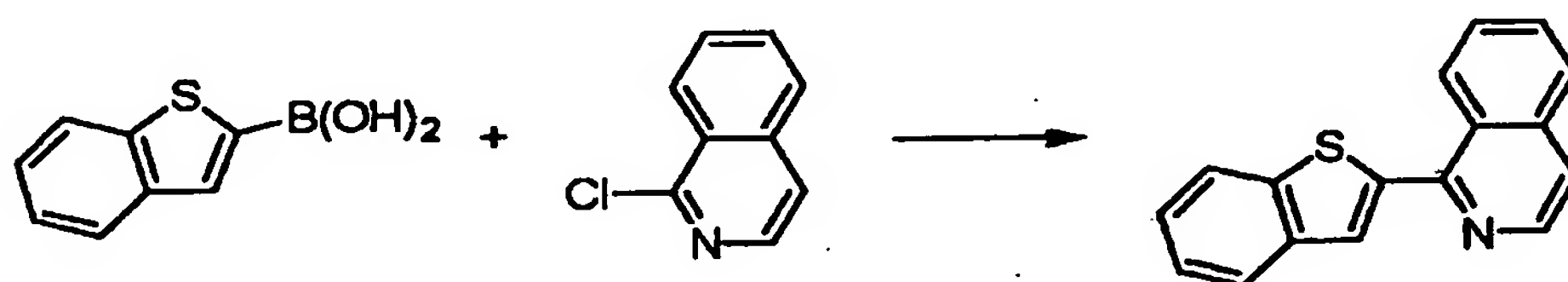


- 15 100 ml の4つ口フラスコにグリセロール50 ml を入れ、窒素バ  
 プリングしながら130~140℃で2時間加熱攪拌した。グリセロー

ルを100℃まで放冷し、1-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)イソキノリン1.61g (5.01mmole), イリジウム(III)アセチルアセトネート0.50g (1.02mmole)を入れ、窒素気流下で8時間還流攪拌した。反応物を室温まで冷却して1N-塩酸600mlに注入し、沈殿物を濾取・水洗した。この沈殿物をクロロホルムを溶離液としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、トリス[1-(9,9-ジメチルフルオレン-2-イル)イソキノリン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III)の赤色粉末0.38g (収率32.3%)を得た。MALDI-TOF MSによりこの化合物のM<sup>+</sup>である1153.4を確認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルのλ<sub>max</sub>は648nmで、量子収率はIr(ppy)<sub>3</sub>=1.0としたとき0.66だった。

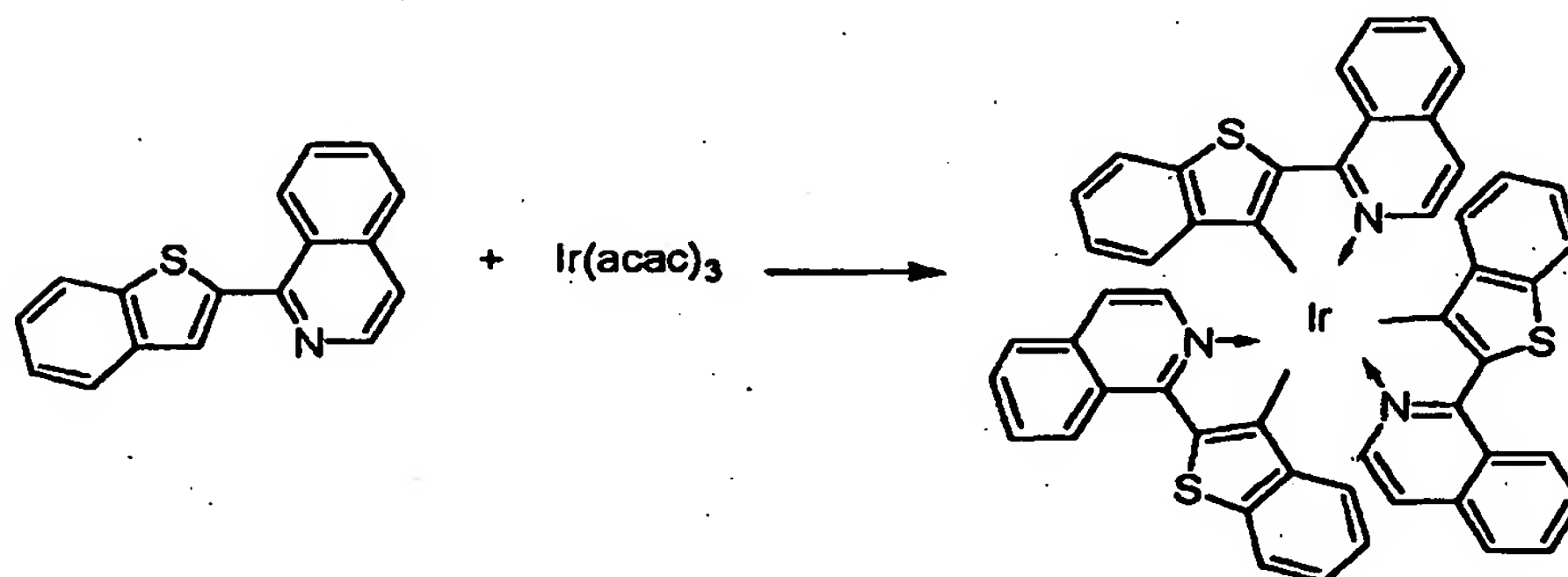
この化合物を用いて作成した実施例2のEL素子に電圧を印加してλ<sub>max</sub>が650nmの赤色発光を確認した。

<実施例9> (例示化合物No. 25の合成)



100mlの3つ口フラスコにチアナフテン-2-ボロン酸(アルドリッチ社製)4.45g (25.0mmole)、1-クロロイソキノリン4.09g (25.0mmole)、トルエン25ml、エタノール12.5mlおよび2M-炭酸ナトリウム水溶液25mlを入れ、窒素気流下室温で攪拌しながらテトラキス(トリフェニルホスフィン)パラジウム(0)0.98g (0.85mmole)を加えた。その後、窒素気流下で8時間還流攪拌した。反応終了後、反応物を冷却して冷水およびトルエンを加えて抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグ

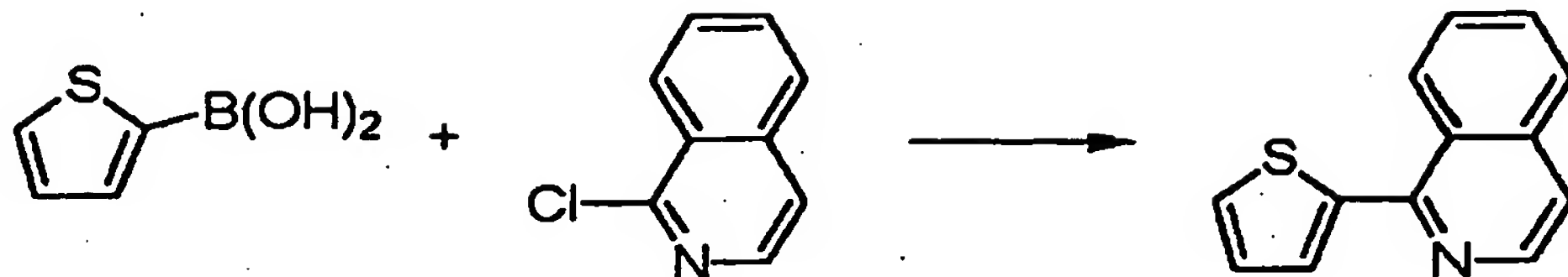
ネシウムで乾燥して溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマト（溶離液：クロロホルム）で精製し、1-（チアナフテン-2-イル）イソキノリン4.20g（収率64.3%）を得た。



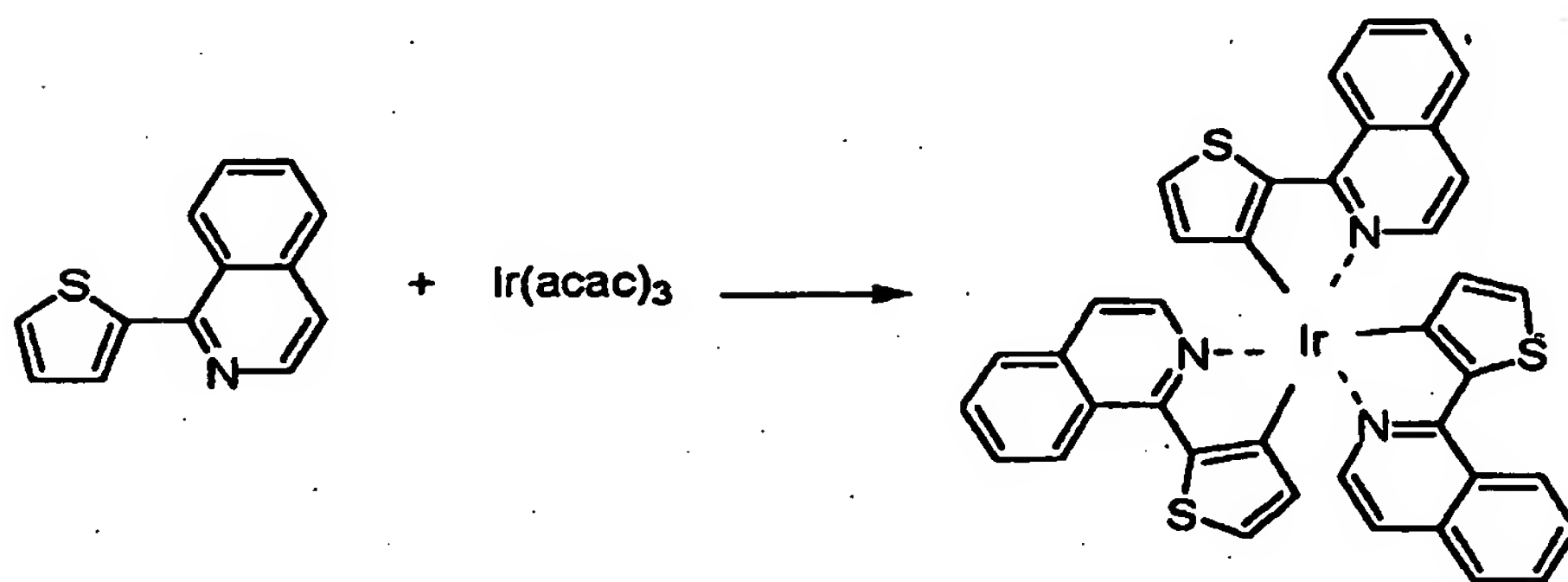
- 5 100mlの4つ口フラスコにグリセロール50mlを入れ、窒素パ  
ブリングしながら130~140℃で2時間加熱攪拌した。グリセロー  
ルを100℃まで放冷し、1-（チアナフテン-2-イル）イソキノリ  
ン1.31g（5.01mmole）、イリジウム（III）アセチル  
アセトネート0.50g（1.02mmole）を入れ、窒素気流下2  
10 10℃付近で5時間加熱攪拌した。反応物を室温まで冷却して1N-塩  
酸300mlに注入し、沈殿物を濾取・水洗した。この沈殿物をクロ  
ホルムを溶離液としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、  
トリス[1-（チアナフテン-2-イル）イソキノリン-C<sup>3</sup>, N]イリジウ  
ム(III)の赤色粉末0.25g（収率25.2%）を得た。MALDI-TOF  
15 MSによりこの化合物のM<sup>+</sup>である973.1を確認した。この化合物のトル  
エン溶液の発光スペクトルのλ<sub>max</sub>は686nm、量子収率は  
Ir(ppy)=1.0とした際、0.07だった。

- 20 化合物No. 1の代わりにこの化合物を用いた以外は実施例1と全く  
同様にしてEL素子を作成し、この素子に電圧を印加して深赤色の発光  
を確認した。

## &lt;実施例 10&gt; (例示化合物 No. 24 の合成)



- 100 ml の 3 つ口フラスコに 2-チオフェンボロン酸 (アルドリッチ社製) 2.56 g (20.0 mmol)、1-クロロイソキノリン 3.27 g (20.0 mmol)、トルエン 18 ml、エタノール 9 ml および 2 M-炭酸ナトリウム水溶液 18 ml を入れ、窒素気流下室温で攪拌しながらテトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウム (0) 0.72 g (0.62 mmol) を加えた。その後、窒素気流下で 9 時間還流攪拌した。反応終了後、反応物を冷却して冷水およびトルエンを加えて抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥して溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶離液: クロロホルム) で精製し、ヘキサン-メタノール混合溶媒で再結晶して 1-(2-チエニル) イソキノリン 2.40 g (収率 56.8%) を得た。



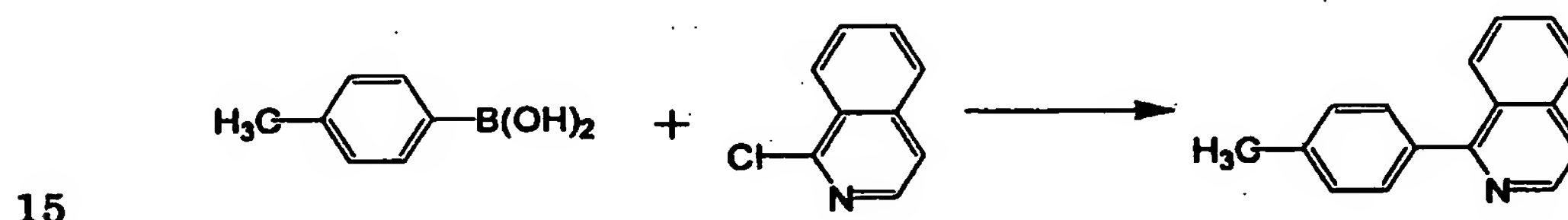
15

100 ml の 4 つ口フラスコにグリセロール 50 ml を入れ、窒素バブリングしながら 130~140℃ で 2 時間加熱攪拌した。グリセロー

ルを100℃まで放冷し、1-(2-チエニル)イソキノリン1.05  
 g (4.97 mmol)、イリジウム(III)アセチルアセトネー  
 ト0.50 g (1.02 mmol)を入れ、窒素気流下8時間還流攪  
 拌した。反応物を室温まで冷却して1N-塩酸600 mlに注入し、沈  
 殿物を濾取・水洗した。この沈殿物をクロロホルムを溶離液としたシリ  
 カゲルカラムクロマトで精製し、トリス[1-(2-チエニル)イソキノ  
 リン-C<sup>3</sup>, N]イリジウム(III)の赤色粉末0.38 g (収率45.  
 2%)を得た。MALDI-TOF MSによりこの化合物のM<sup>+</sup>である823.1を確  
 認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルのλ<sub>max</sub>は64  
 2 nm、発光量子収率はIr(ppy)<sub>3</sub>=1.0としたとき0.43だった。

化合物No. 1の代わりにこの化合物を用いた以外は実施例1と全く  
 同様にしてEL素子を作成し、この素子に電圧を印加してλ<sub>max</sub>が6  
 40 nmの赤色発光を確認した。

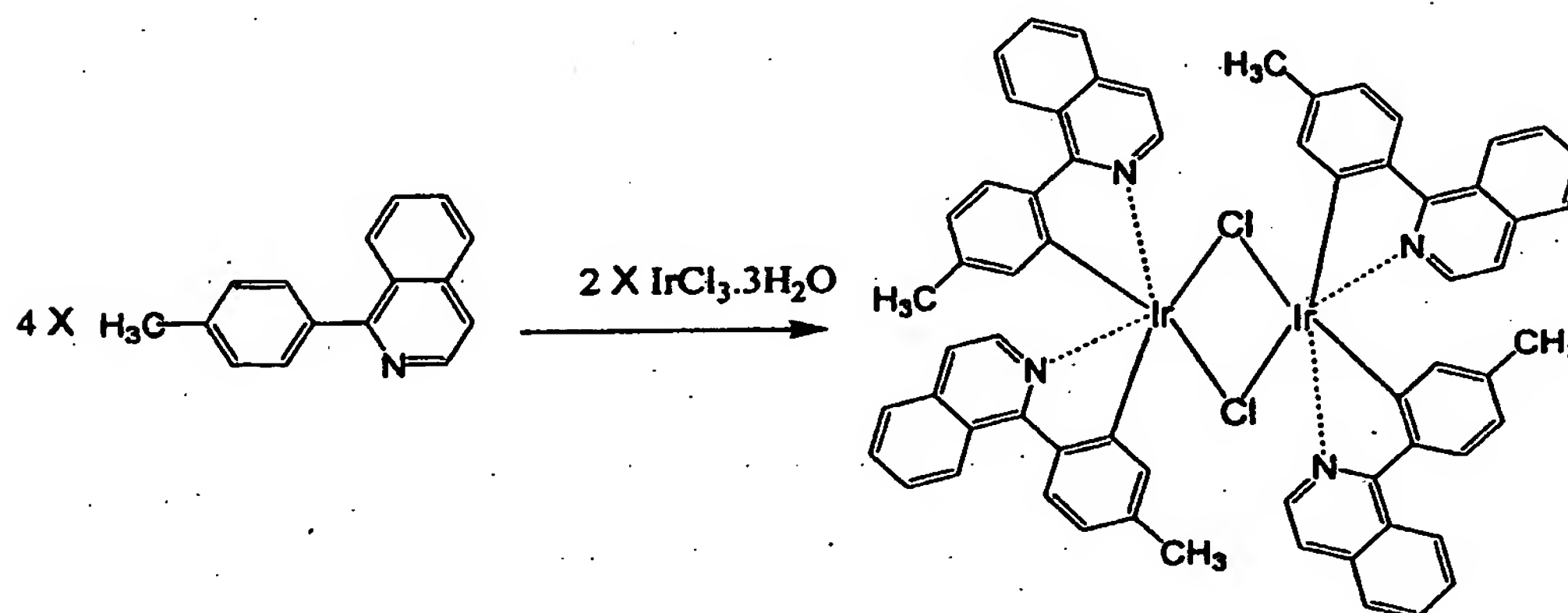
#### <実施例11>



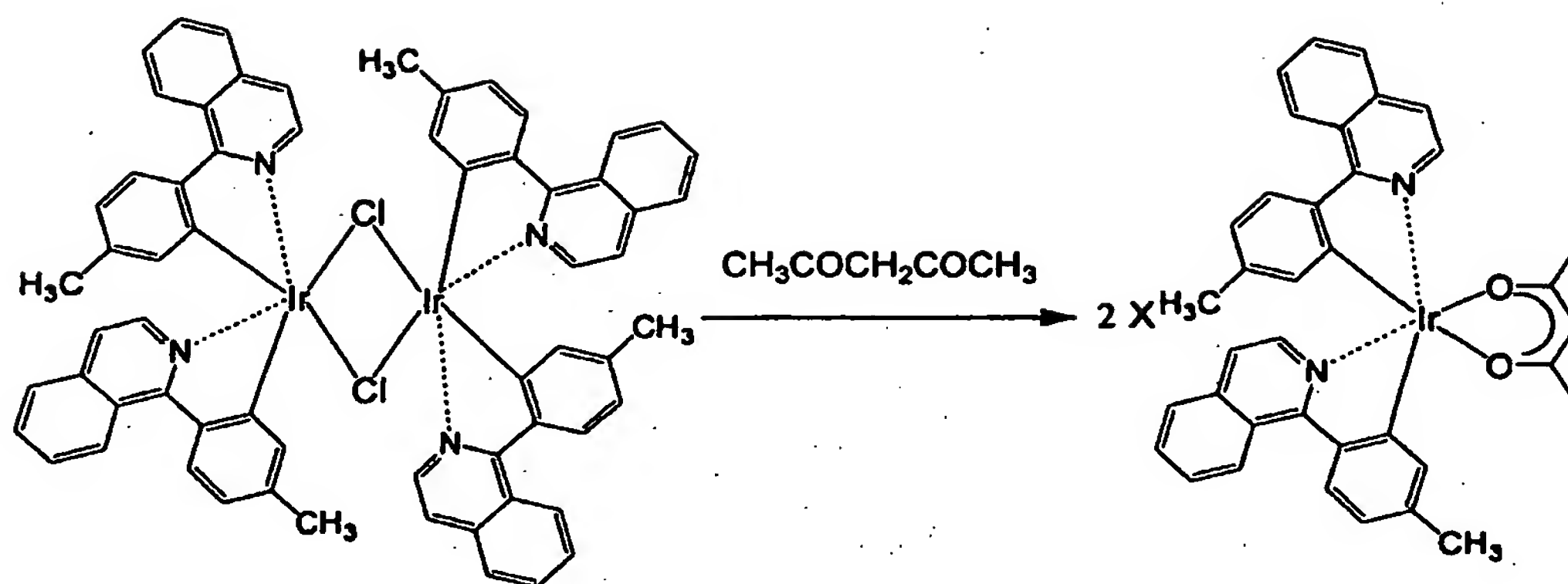
200 mlの3つ口フラスコに4-メチルフェニルボロン酸（アルドリ  
 ッチ社製）3.40 g (25.0 mmol)、1-クロロイソキノリン4.0  
 9 g (25.0 mmol)、トルエン25 ml、エタノール12.5  
 mlおよび2M-炭酸ナトリウム水溶液25 mlを入れ、窒素気流下室  
 温で攪拌しながらテトラキス（トリフェニルホスフィン）パラジウム  
 (0) 0.98 g (0.85 mmol)を加えた。その後、窒素気流下で8時  
 間還流攪拌した。反応終了後、反応物を冷却して冷水およびトルエンを  
 加えて抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、硫酸マグネシウムで乾燥し  
 て溶媒を減圧乾固した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー



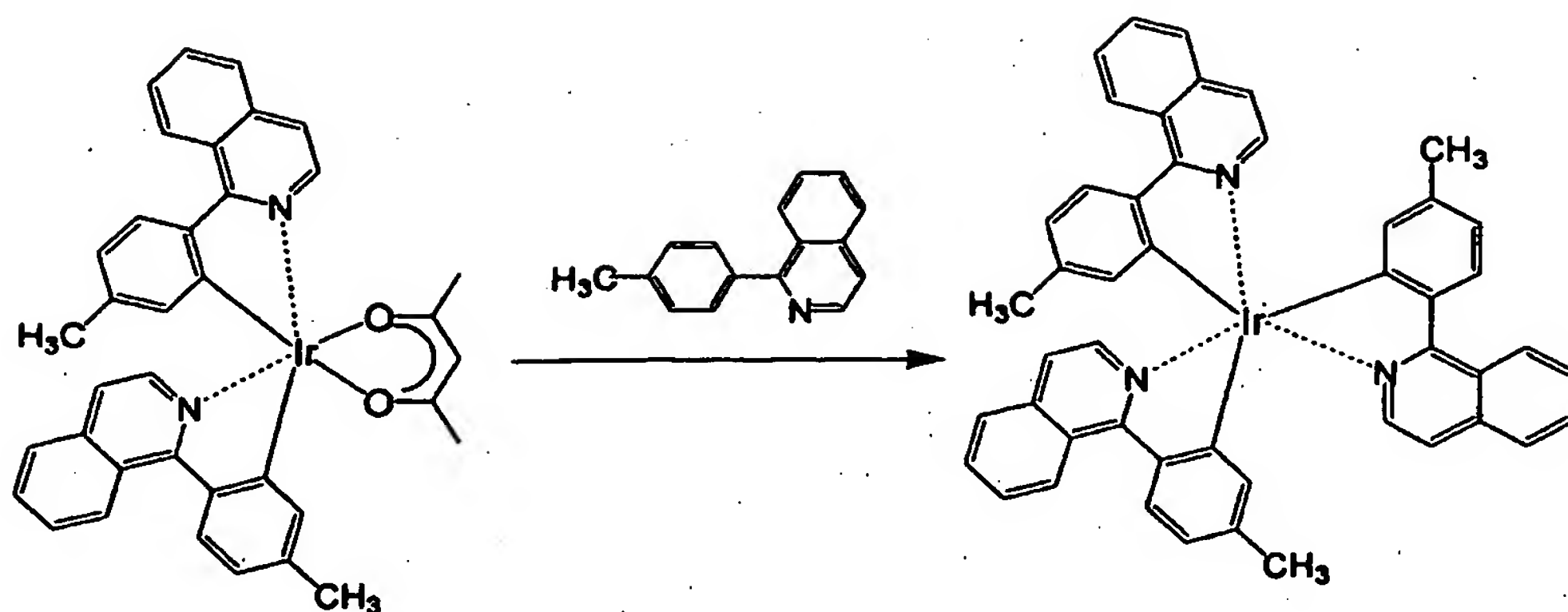
(溶離液：クロロホルム／メタノール：10／1)で精製し、1-(4-メチルフェニル)イソキノリン 2.80 g (収率 51.1%)を得た。この化合物の重クロロホルム溶液の  $^1\text{H-NMR}$  スペクトルを図 9 に示す。



- 5        200ml の 3 つ口フラスコに塩化イリジウム(III)・3 水和物 (アクロス社製) 0.58 g (1.64mmole)、1-(4-メチルフェニル)イソキノリン 1.61 g (7.34mmole)、エトキシエタノール 45ml と水 15ml を入れ、窒素気流下室温で 30 分間攪拌し、その後 24 時間還流攪拌した。反応物を室温まで冷却し、沈殿物を濾取水洗後、エタノールおよびアセトン
- 10        で順次洗浄した。室温で減圧乾燥し、テトラキス[1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 661) の赤色粉末 1.02 g (収率 93.4%)を得た。この化合物の重クロロホルム溶液の  $^1\text{H-NMR}$  スペクトルを図 10 に示す。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\text{max}}$  は 617nm、量子収率は
- 15         $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  としたとき 0.46 だった。



- 200m l の 3 つ口フラスコにエトキシエタノール 70m l、テトラキス  
 [1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリ  
 ジウム(III) 0.95 g (0.72 mmole)、アセチルアセトン 0.22 g (2.10m  
 5 mole) と炭酸ナトリウム 1.04 g (9.91 mmole) を入れ、窒素気流下  
 室温で 1 時間攪拌し、その後 15 時間還流攪拌した。反応物を氷冷し、  
 沈殿物を濾取水洗した。この沈殿物をシリカゲルカラムクロマトグラフ  
 ー（溶離液：クロロホルム／メタノール：30／1）で精製し、ビス  
 [1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)  
 10 イリジウム(III)（例示化合物 No.43）の赤色粉末 0.43 g（収率  
 41.3%）を得た。MALDI-TOF MS によりこの化合物の M<sup>+</sup>である 728.2 を  
 確認した。この化合物の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトルを図  
 11 に示す。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの λ<sub>max</sub>は  
 622 nm, 量子収率は Ir(ppy)=1.0 としたとき 0.70 だった。



- 100ml の 3 つ口フラスコに 1-(4-メチルフェニル)イソキノリン 0.27 g (1.23 mmole)、ビス[1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) 0.36 g (0.49 mmole) とグリセロール 25ml を入れ、窒素気流下 180℃付近で 8 時間加熱攪拌した。反応物を室温まで冷却して 1N-塩酸 170ml に注入し、沈殿物を濾取・水洗し、100℃で 5 時間減圧乾燥した。この沈殿物をクロロホルムを溶離液としたシリカゲルカラムクロマトグラフィーで精製し、トリス[1-(4-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 19) の赤色粉末 0.27 g (収率 64.5 %) を得た。MALDI-TOF MS によりこの化合物の M<sup>+</sup>である 847.3 を確認した。この化合物の重クロロホルム溶液の <sup>1</sup>H-NMR スペクトルを図 12 に示す。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの λ<sub>max</sub> は 619nm, 量子収率は Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 としたとき 0.65 だった。

#### 15 <実施例 12>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-n-ヘキシルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

- 20 テトラキス[1-(4-n-ヘキシルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 667)

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  616 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.40

ビス[1-(4-n-ヘキシルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 196)

5 MALDI-TOF MS： $M+$  868.4

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  625 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.87

トリス[1-(4-n-ヘキシルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 192)

10 MALDI-TOF MS： $M+$  1057.5

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  621 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.88

#### <実施例 13>

15 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-n-オクチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

テトラキス[1-(4-n-オクチルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N]( $\mu$ -ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 669)

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  617 nm

20 量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.47

ビス[1-(4-n-オクチルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 218)

MALDI-TOF MS： $M+$  924.4

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  625 nm

25 量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：1.05

この化合物の重クロロホルム溶液の  $^1\text{H-NMR}$  スペクトルを図 13 に示

す。

トリス[1-(4-n-オクチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 214)

MALDI-TOF MS : M+ 1141.6

5 トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  620 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.75

#### <実施例 14>

10 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-tert-ブチルフェニルボロン酸 (アルドリッチ社製) を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

テトラキス[1-(4-tert-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]( $\mu$ -ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 665)

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  614 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.39

15 ビス[1-(4-tert-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 174)

MALDI-TOF MS : M+ 812.3

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  626 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.66

20 トリス[1-(4-tert-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 170)

MALDI-TOF MS : M+ 973.4

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  618 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.73

#### 25 <実施例 15>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-フルオロフ

エニルボロン酸（アルドリッチ社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして次の化合物を合成した。

テトラキス[1-(5-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)（例示化合物 No. 684）

5 トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 625 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率：0.22

ビス[1-(5-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)（例示化合物 No. 47）

MALDI-TOF MS：M+ 736.2

10 トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 629 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率：0.65

トリス[1-(5-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III)（例示化合物 No. 23）

MALDI-TOF MS：M+ 859.2

15 トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 626 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率：0.62

#### <実施例 16>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フェノキシフェニルボロン酸（アルドリッチ社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

20 ビス[1-(4-フェノキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)（例示化合物 No. 365）

MALDI-TOF MS：M+ 884.2

トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 608 nm

25 量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 としたときの量子収率：0.65

トリス[1-(4-フェノキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウ



ム(III) (例示化合物 No. 361)

MALDI-TOF MS : M+ 1081.3

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  604 nm

量子収率  $Ir(ppy)_3=1.0$  としたときの量子収率 : 0.54

5 <実施例 17>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-メチルフェニルボロン酸 (アルドリッチ社製) を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

10 ビス[1-(5-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 44)

MALDI-TOF MS : M+ 728.2

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  638 nm

量子収率  $Ir(ppy)_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.78

15 トリス[1-(5-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 20)

MALDI-TOF MS : M+ 847.3

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  631 nm

量子収率  $Ir(ppy)_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.71

<実施例 18>

20 実施例 11 の 1-(4-メチルフェニル)イソキノリンの代わりに実施例 7 で合成した 1-フェニルイソキノリンを用い、実施例 11 と同様にテトラキス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 660) を経由して次の化合物を合成した。

25 ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 42)

MALDI-TOF MS : M+ 700.2

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{\max}$  622 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.59

#### <実施例 19>

実施例 7 のフェニルボロン酸の代わりに 3-ビフェニルボロン酸 (フ  
ロンティア社製) を用いて 1-(ビフェニル-3-イル)イソキノリンを  
5 合成し、実施例 7 と同様にして 1-(ビフェニル-3-イル)イソキノ  
リンとイリジウム (III) アセチルアセトネートからトリス[1-(ビフェ  
ニル-3-イル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N]イリジウム (III) (例示化合物  
No. 3) を合成した。MALDI-TOF MS によりこの化合物の  $\text{M}^+$  である  
10 1033.3 を確認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\max}$   
は 621 nm, 量子収率は  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  としたとき 0.53 であった。

#### <実施例 20>

実施例 11 のアセチルアセトンの代わりに 3-メチル-2,4-ペン  
タンジオン (アルドリッチ社製) を用い、実施例 11 と同様にしてビス[1  
15 -(4-メチルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N](3-メチル-2,4-ペ  
ンタンジオナト)イリジウム (III) (例示化合物 No. 126) を合成した。  
MALDI-TOF MS によりこの化合物の  $\text{M}^+$  である 742.2 を確認した。この  
化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\max}$  は 627 nm, 量子収  
率は  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  としたとき 0.81 であった。

#### <実施例 21>

実施例 11 のアセチルアセトンの代わりに 2,2,6,6-テトラメチル-  
3,5-ヘプタンジオン (東京化成工業製) を用い、実施例 11 と同様にし  
てビス[1-(4-メチルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N](2,2,6,6-テ  
トラメチル-3,5-ヘプタンジオナト)イリジウム (III) (例示化合物  
25 No. 127) を合成した。MALDI-TOF MS によりこの化合物の  $\text{M}^+$  である  
812.3 を確認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\max}$

$\lambda_{\text{max}}$  は 624 nm, 量子収率は  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  としたとき 0.76 であった。

#### <実施例 22>

実施例 11 の 1-(4-メチルフェニル)イソキノリンの代わりに 2-フェニルピリジンを用い、実施例 11 と同様にテトラキス(2-フェニルピリジン- $\text{C}^2$ , N)( $\mu$ -ジクロロ)ジイリジウム(III)を経由してビス(2-フェニルピリジン- $\text{C}^2$ , N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)を合成した。この化合物と実施例 7 で合成した 1-フェニルイソキノリンを  
5 実施例 11 と同様に反応させ、ビス(2-フェニルピリジン- $\text{C}^2$ , N)(1-フェニルイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 64)を得た。MALDI-TOF MS によりこの化合物の  $M^+$  である 705.2 を確認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\text{max}}$  は 618 nm、量子収率は  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  としたとき 0.43 であった。  
10

#### <実施例 23>

実施例 18 で合成したビス(1-フェニルイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)と 2-フェニルピリジンを実施例 22  
15 と同様に反応させ、ビス(1-フェニルイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)(2-フェニルピリジン- $\text{C}^2$ , N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 31)を得た。MALDI-TOF MS によりこの化合物の  $M^+$  である 755.2 を確認した。この化合物のトルエン溶液の発光スペクトルの  $\lambda_{\text{max}}$  は 617 nm, 量子収率は  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  としたとき 0.46 であった。  
20

#### <実施例 24>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-ブチルフェニルボロン酸 (ランカスター社製) を用いる以外は実施例 11 と同様に  
して以下の化合物を逐次合成した。

25 テトラキス[1-(4-ブチルフェニル)イソキノリン- $\text{C}^2$ , N]( $\mu$ -ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 664)

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  629 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.44

ビス[1-(4-ブチルフェニル)イソキノリン- $C^2$ , N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 163)

5 MALDI-TOF MS： $M+812.0$

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  626 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.91

トリス[1-(4-ブチルフェニル)イソキノリン- $C^2$ , N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 159)

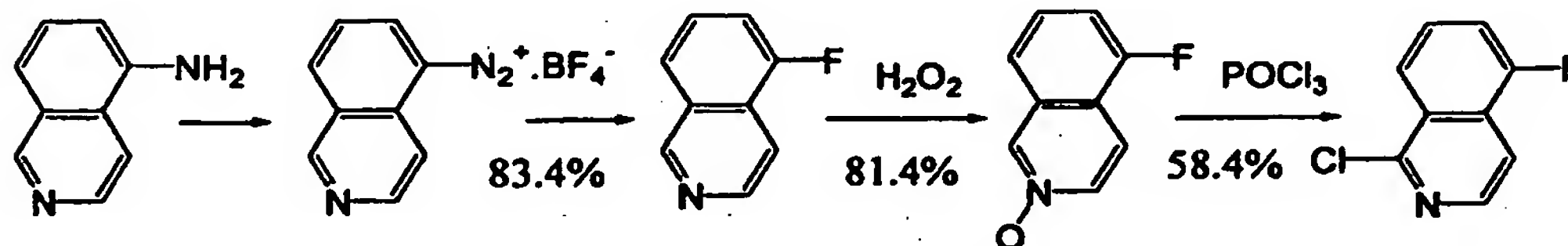
10 MALDI-TOF MS： $M+973.3$

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  621 nm

量子収率  $\text{Ir(ppy)}_3=1.0$  とした際の量子収率：0.82

#### <実施例 25>

5-アミノイソキノリン (東京化成工業製) を用い、次に示す経路と収率で 1-クロロ-5-フルオロイソキノリンを合成した。



実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりにフェニルボロン酸を用い、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-フルオロイソキノリンを用いて 1-フェニル-5-フルオロイソキノリンを合成し、これを 1-(4-メチルフェニル)イソキノリンの代りに用いる以外は、実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

20 テトラキス(1-フェニル-5-フルオロイソキノリン- $C^2$ , N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 704)

トルエン溶液の発光スペクトル： $\lambda_{\max}$  620 nm

量子収率  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.38

ビス(1-フェニル-5-フルオロイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 240)

MALDI-TOF MS :  $M+735.8$

5

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{\text{max}} 636 \text{ nm}$

量子収率  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.70

トリス(1-フェニル-5-フルオロイソキノリン- $\text{C}^2$ , N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 155)

MALDI-TOF MS :  $M+858.9$

10

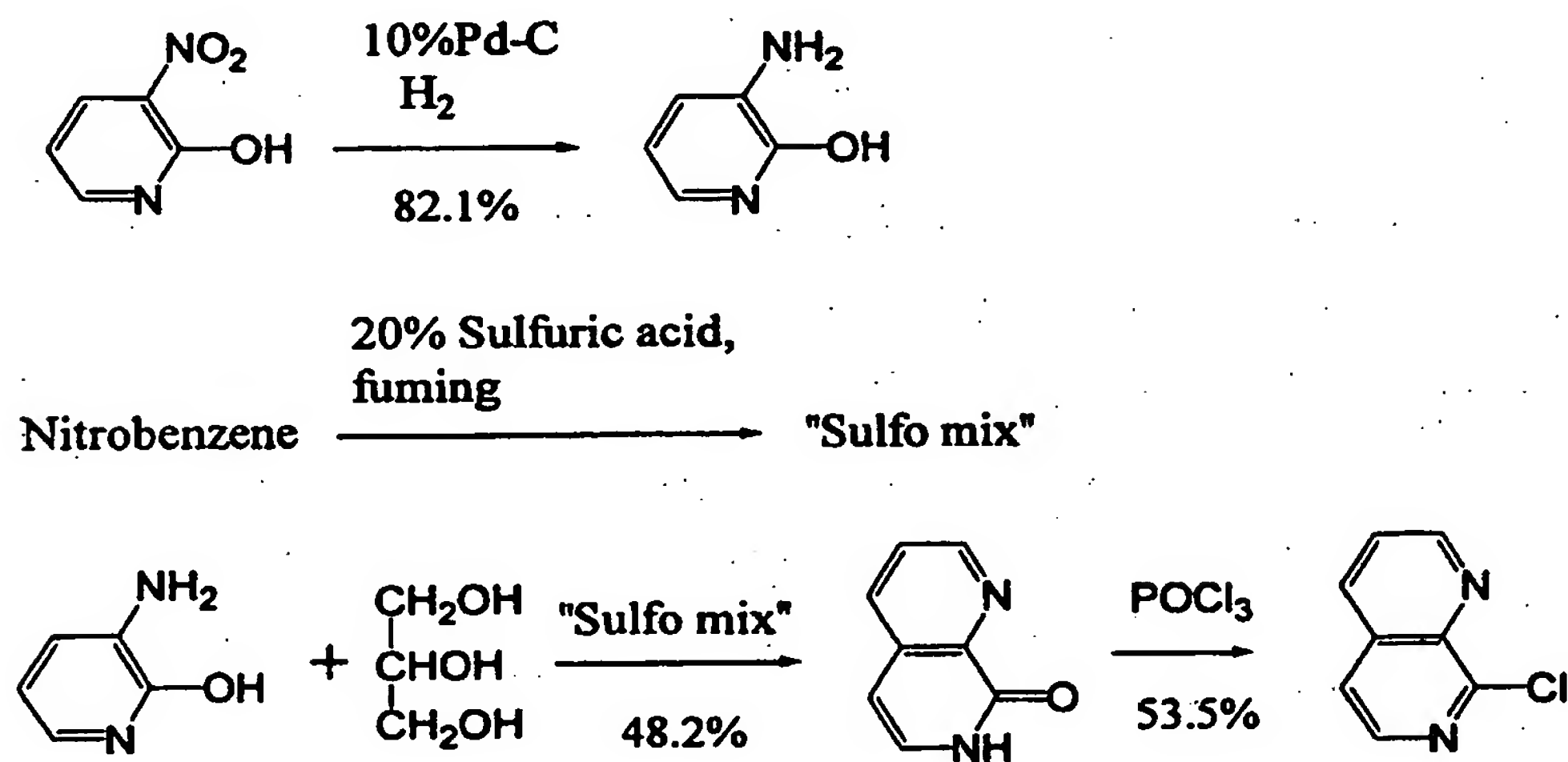
トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{\text{max}} 628 \text{ nm}$

量子収率  $\text{Ir}(\text{ppy})_3=1.0$  とした際の量子収率 : 0.55

#### <実施例 26>

3-ニトロ-2-ヒドロキシピリジン (アルドリッチ社製) を用い、次に示す経路と収率で 1-クロロ-8-アザイソキノリンを合成した。閉環に用いた "Sulfo mix" は J. Org. Chem., 1943, 8, 544-549. に記載の方法で調製した。

15



実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに、上記で得た 1-クロ

ロー 8 - アザイソキノリンを用いて 1 - フェニル - 8 - アザイソキノリンを合成し、これを 1 - (4 - メチルフェニル) イソキノリンの代わりに用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成した。

5 テトラキス(1 - フェニル - 8 - アザフェニルイソキノリン - C<sup>2</sup>, N) (μ - ジクロロ) ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 755)

トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  635 nm

ビス(1 - フェニル - 8 - アザフェニルイソキノリン - C<sup>2</sup>, N) (アセチルアセトナト) イリジウム(III) (例示化合物 No. 612)

MALDI-TOF MS: M + 701.8

10 トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  631 nm

トリス(1 - フェニル - 8 - アザフェニルイソキノリン - C<sup>2</sup>, N) イリジウム(III) (例示化合物 No. 609)

MALDI-TOF MS: M + 807.9

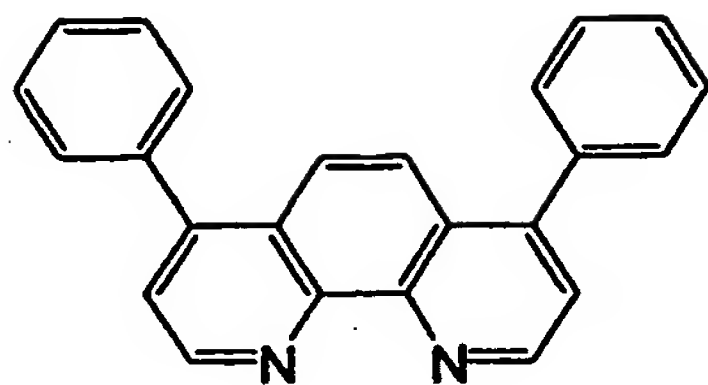
トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  622 nm

15 <実施例 27>

図 - 1(b) に示す積層構造の EL 素子を作成した。1.1mm の無アルカリガラス基板 15 上にパターンニング形成された ITO 電極 14 上に、蒸着圧力 10<sup>-4</sup>Pa の真空中でホール輸送層 13 として α-NPD を蒸着レート 0.1nm/sec で 40nm の厚さに真空蒸着し、次に発光層として CBP 中に  
20 トリス(1 - フェニルイソキノリン - C<sup>2</sup>, N) イリジウム(III) (例示化合物 No. 1) を 9% の濃度になるように共蒸着して 40nm の厚みで形成した。このとき CBP の蒸着レートは 0.1nm/sec とし、イリジウム錯体は 0.09nm/sec になるように蒸着ボートの加熱条件を制御した。

続いて電子輸送層として下記構造式で示すバソフェナントロリン  
25 Bphen を蒸着レート 0.1nm/sec で 40nm の厚みで形成した。





その上に電子注入層 16 としてフッ化カリウム層を蒸着レート 0.5nm/sec で約 1nm 蒸着した後、陰極金属 11 としてアルミニウムを蒸着レート 1nm/sec で 150nm 蒸着した。

- 5 この実施例の素子では ①Bphen を用いて電子の供給を増やし、かつホールのリークを抑制 ②電子注入性を KF を用いて改善、さらに ③光学的膜厚の最適化、等の効果を期待して作成した。得られた素子の電圧-効率-輝度特性を図 5 に示す。

10 本例の素子により、輝度 100cd/m<sup>2</sup> で 6.2lm/W、300cd/m<sup>2</sup> で 5.2lm/W の効率を実現することに成功した。CIE 座標は 40cd/m<sup>2</sup> のとき (0.68、0.317)、113cd/m<sup>2</sup> のとき (0.682、0.315)、980cd/m<sup>2</sup> のとき (0.678、0.317)、であって、NTSC 対応の色基準に従い、十分満足できる色純度を与えていることがわかった。従って、その発光色は異なる輝度および電圧に於いても不変であった。

- 15 トリス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III)の配位子である 1-フェニルイソキノリンは配位子骨格に特に置換基を付加して錯体の発光色調整を行わなくても NTSC 準拠規格の赤発光を得ることができ、赤色発光材料として優れている。また、置換基のない配位子で実現できるため、合成ステップも短縮されるなど実用面から見てもより
- 20 望ましい発光材料である。

発光輝度 300cd/m<sup>2</sup> での駆動条件は、印加電圧 V=5 volt で電流値は J=1.5mA/cm<sup>2</sup>、同じく 14000cd/m<sup>2</sup> では 10volt、520mA/cm<sup>2</sup> であった。このようにして作成した EL 素子の外部量子効率を図 6 に示すが、

100cd/m<sup>2</sup> で 10%を越すなど従来の EL 素子の効率を大きく改善できていることが分かる。

<実施例 28>

5 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-エチルフェニルボロン酸（ランカスター社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして容易に、以下の化合物を逐次合成することができる。

テトラキス[1-(4-エチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 662)

10 ビス[1-(4-エチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 137)

トリス[1-(4-エチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 135)

<実施例 29>

15 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-プロピルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-プロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 663)

20 ビス[1-(4-プロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 148)

トリス[1-(4-プロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 144)

<実施例 30>

25 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-イソプロピルフェニルボロン酸（ランカスター社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

5      トリス[1-(4-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 146)

<実施例 31>

10      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-n-ペンチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-n-ペンチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 666)

ビス[1-(4-n-ペンチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 185)

15      トリス[1-(4-n-ペンチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 181)

<実施例 32>

20      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-n-ヘプチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-n-ヘプチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 668)

ビス[1-(4-n-ヘプチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 207)

25      トリス[1-(4-n-ヘプチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 203)

## &lt;実施例 33&gt;

実施例 1.1 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロフェニルボロン酸（アルドリッチ社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして次の化合物を合成した。

- 5      テトラキス[1-(4-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 683)

トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  602 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率: 0.43

- 10      ビス[1-(4-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 46)

MALDI-TOF MS: M+ 737.2

トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  603 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率: 0.95

- 15      トリス[1-(4-フルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 22)

MALDI-TOF MS: M+ 859.2

トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  596 nm

量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率: 0.92

## &lt;実施例 34&gt;

- 20      実施例 1.1 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロ-3-メチルフェニルボロン酸（アルドリッチ社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして次の化合物を合成した。

テトラキス[1-(4-フルオロ-5-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 738)

- 25      トルエン溶液の発光スペクトル:  $\lambda_{\max}$  618 nm

ビス[1-(4-フルオロ-5-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,

N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 222)

MALDI-TOF MS : M+ 765.2

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  615 nm

トリス[1-(4-フルオロ-5-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,

5 N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 226)

MALDI-TOF MS : M+ 901.2

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  616 nm

### <実施例 35>

10 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオ  
ロメチルフェニルボロン酸 (ランカスター社製) を用いる以外は実施例  
11 と同様にして次の化合物を合成した。

テトラキス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,  
C<sup>2</sup>, N]( $\mu$ -ジクロロ)ジイリジウム(III)

MALDI-TOF MS : M+ 765.2

15 トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  614 nm

ビス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

MALDI-TOF MS : M+ 836.1

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  623nm

20 量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.23

トリス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 11)

MALDI-TOF MS : M+ 1009.2

トルエン溶液の発光スペクトル :  $\lambda_{max}$  608 nm

25 量子収率 Ir(ppy)<sub>3</sub>=1.0 とした際の量子収率 : 0.48

### <実施例 36>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-トリフルオロメチルフェニルボロン酸（ランカスター社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

5 テトラキス[1-(5-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(5-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

10 トリス[1-(5-トリフルオロメチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III)（例示化合物 No. 12）

#### 10 <実施例 37>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3,5-ジフルオロ-3-メチルフェニルボロン酸（アルドリッチ社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして次の化合物を合成した。

15 テトラキス[1-(3,5-ジフルオロ-3-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)（例示化合物 No. 686）

トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 618 nm

ビス[1-(3,5-ジフルオロ-3-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)（例示化合物 No. 425）

MALDI-TOF MS：M+ 765.2

20 トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 615 nm

トリス[1-(3,5-ジフルオロ-3-メチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III)（例示化合物 No. 421）

MALDI-TOF MS：M+ 901.2

トルエン溶液の発光スペクトル：λ<sub>max</sub> 616 nm

#### 25 <実施例 38>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 2,3-ジフル



オロフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

5     ビス[1-(5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 501)

トリス[1-(5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 497)

<実施例 39>

10     実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 2, 3-ジフルオロ-4-n-ブチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして容易に、以下の化合物を合成することができる。

15     テトラキス[1-(4-n-ブチル-5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 698)

ビス[1-(4-n-ブチル-5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 534)

20     トリス[1-(4-n-ブチル-5, 6-ジフルオロフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 530)

<実施例 40>

25     実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンを用いて実施例 7 と同様にして 1-フェニル-5-トリフルオロメチルイソキノリンを合成し、これを用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-フェニル-5-トリフルオロメチルイソキノリン-  
C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 706)

ビス[1-フェニル-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

5      トリス[1-フェニル-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 83)

<実施例 41>

10      実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリ  
フルオロメチルイソキノリンを用いて実施例 7 と同様に 1-フェニ  
ル-4-トリフルオロメチルイソキノリンを合成し、これを用いる以外  
は実施例 11 と同様に 以下の化合物を逐次合成することが容易であ  
る。

テトラキス[1-フェニル-4-トリフルオロメチルイソキノリン-  
C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 707)

15      ビス[1-フェニル-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-フェニル-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>,  
N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 82)

<実施例 42>

20      実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-フル  
オロメチルイソキノリンを用いて実施例 7 と同様に 1-フェニル-  
4-フルオロメチルイソキノリンを合成し、これを用いる以外は実施例  
11 と同様に 以下の化合物を逐次合成することが容易である。

25      テトラキス[1-フェニル-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-  
ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 705)

ビス[1-フェニル-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルア

セトナト)イリジウム(III)

トリス[1-フェニル-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 81)

<実施例 43>

- 5 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3, 5-ジフルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-フルオロイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

10 テトラキス[1-(3, 5-ジフルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(3, 5-ジフルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(3, 5-ジフルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 232)

15 <実施例 44>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-フルオロイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

20 テトラキス[1-(4-フルオロフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-フルオロフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

25 トリス[1-(4-フルオロフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 230)

<実施例 45>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-フルオロイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

5      テトラキス[1-(4-フルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-フルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

10      トリス[1-(4-フルオロフェニル)-5-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 228)

#### <実施例 46>

15      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメチルフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-フルオロイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

20      トリス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 256)

#### <実施例 47>

25      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-フルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-フルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

5      トリス[1-(4-フルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 231)

<実施例 48>

10      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-フルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-フルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

15      ビス[1-(4-フルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-フルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 229)

<実施例 49>

20      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメチルフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

25      テトラキス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 691)

ビス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-トリフルオロ

メチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 260)

<実施例 50>

- 5 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメチルフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

10 テトラキス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-トリフルオロメチルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 255)

15 <実施例 51>

- 20 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりにランカスター社製 3, 4, 5, -トリフルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

- 25 ビス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)



トリス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 253)

<実施例 52>

- 5 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりにランカスター社製 3, 4, 5, -トリフルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

- 10 テトラキス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

- 15 ビス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(3, 4, 5, -トリフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 250)

<実施例 53>

- 20 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

- 25 テトラキス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウ

ム(III)

ビス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

- 5      トリス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 268)

<実施例 54>

- 10      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

- 15      テトラキス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 690)

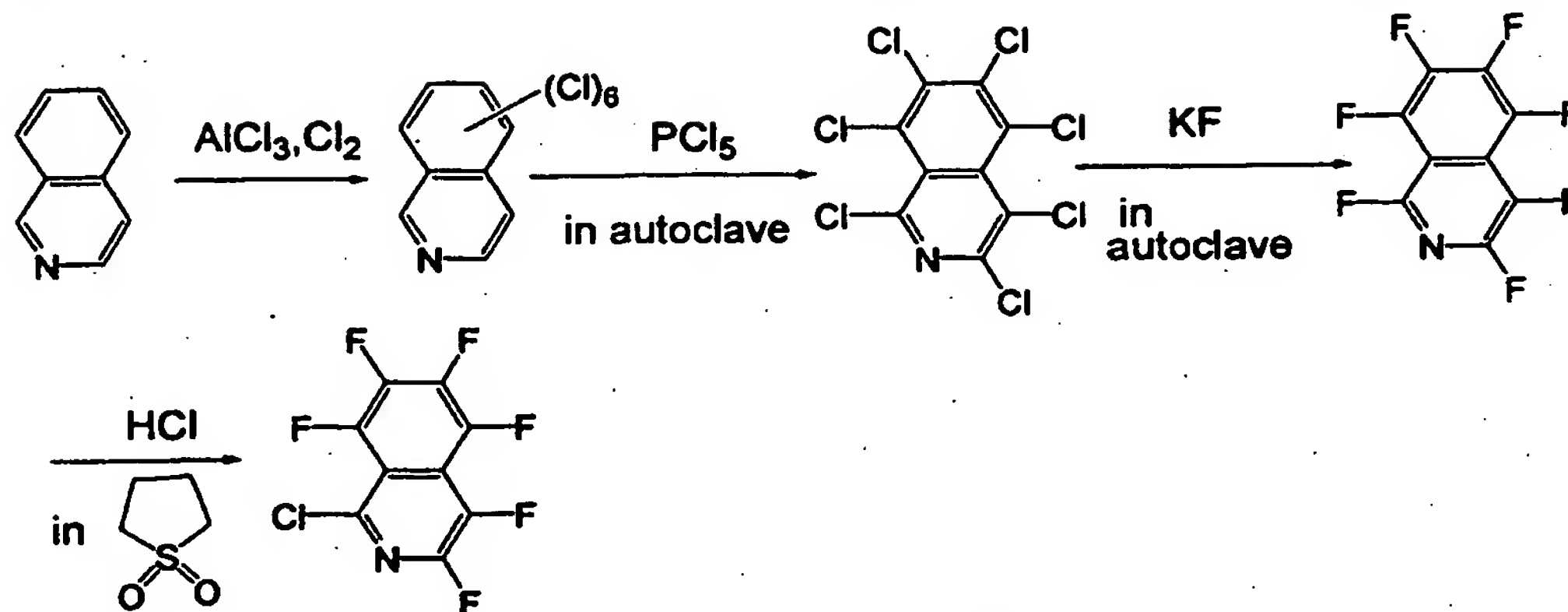
ビス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

- 20      トリス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 272)

<実施例 55>

- 25      文献 J. Chem. Soc. C, 1966, 2328-2331., J. Chem. Soc. C, 1971, 61-67., J. Org. Chem., 1971, 29, 329-332. および Org. Syn., 1960, 40, 7-10. の方法に従って次に示す経路で、容易に 1-クロロ-3, 4, 5, 6, 7,

8-ヘキサフルオロイソキノリンを合成する。



実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニルボロン酸を用い、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-3, 4, 5, 6, 7, 8, -ヘキサフルオロイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

5 テトラキス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-3, 4, 5, 6, 7, 8, -ペンタフルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 709)

10 ビス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-3, 4, 5, 6, 7, 8, -ペンタフルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III) (例示化合物 No. 457)

15 トリス[1-(3, 4, 5, 6-テトラフルオロフェニル)-3, 4, 5, 6, 7, 8, -ペンタフルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 454)

#### <実施例 56>

20 実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-イソプロピルフェニルボロン酸 (ランカスター社製) を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(5-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(5-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

- 5      トリス[1-(5-イソプロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 315)

<実施例 57>

- 10      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-ブチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(5-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 725)

ビス[1-(5-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

- 15      トリス[1-(5-ブチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 316)

<実施例 58>

- 20      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-オクチルフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(5-オクチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 730)

ビス[1-(5-オクチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

- 25      トリス[1-(5-オクチルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 321)

<実施例 59>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-メトキシフェニルボロン酸（ランカスター社製）を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

5      テトラキス[1-(5-メトキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(5-メトキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

10      トリス[1-(5-メトキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III)（例示化合物 No. 375）

<実施例 60>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 3-ヘプチルオキシフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

15      テトラキス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

20      トリス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III)（例示化合物 No. 398）

<実施例 61>

25      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメトキシフェニルボロン酸（アルドリッチ社製）、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

5     ビス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

        トリス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 411)

<実施例 62>

10     実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメトキシフェニルボロン酸、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

15     テトラキス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

        ビス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

20     トリス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 410)

<実施例 63>

25     実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-トリフルオロメトキシフェニルボロン酸を用い、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-フルオロイソキノリンを、それぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。



テトラキス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-フル  
オロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-フルオロイ  
ソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

5      トリス[1-(4-トリフルオロメトキシフェニル)-4-フルオロ  
イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 409)

<実施例 64>

実施例 29 の 1-(4-プロピルフェニル)イソキノリンを用い、実施例  
11 と同様にテトラキス[1-(4-プロピルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>,  
10      N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)を経由してビス[1-(4-プロピル  
フェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)  
を合成する。この化合物と実施例 7 の 1-フェニルイソキノリンを実施  
例 11 と同様に反応させて、ビス[1-(4-プロピルフェニル)イソキノ  
リン-C<sup>2</sup>, N](1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) イリジウム(III)  
15      (例示化合物 No. 283) を合成することが容易である。

<実施例 65>

実施例 11 の 1-(4-メチルフェニル)イソキノリンの代わりに 1-  
フェニルイソキノリンを用い、実施例 11 と同様にテトラキス(1-フェ  
ニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)を経由し  
20      てビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリ  
ジウム(III)を合成する。この化合物と実施例 29 の 1-(4-プロピルフ  
ェニル)イソキノリンを実施例 11 と同様に反応させて、ビス(1-フェ  
ニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)[1-(4-プロピルフェニル)イソキノリン-  
C<sup>2</sup>, N] イリジウム(III) (例示化合物 No. 299) を合成することが容易  
25      である。

<実施例 66>

実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-(4-ヘキシルフェニル) イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

5      ビス [1-(4-ヘキシルフェニル) イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) イリジウム(III) (例示化合物 No. 287)

<実施例 67>

10      実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-フェニルイソキノリンを用い、1-フェニルイソキノリンの代わりに 1-(4-ヘキシルフェニル) イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

        ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) [1-(4-ヘキシルフェニル) イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] イリジウム(III) (例示化合物 No. 303)

<実施例 68>

15      実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-(4-オクチルフェニル) イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

        ビス [1-(4-オクチルフェニル) イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) イリジウム(III) (例示化合物 No. 289)

<実施例 69>

20      実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-フェニルイソキノリンを用い、1-フェニルイソキノリンの代わりに 1-(4-オクチルフェニル) イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

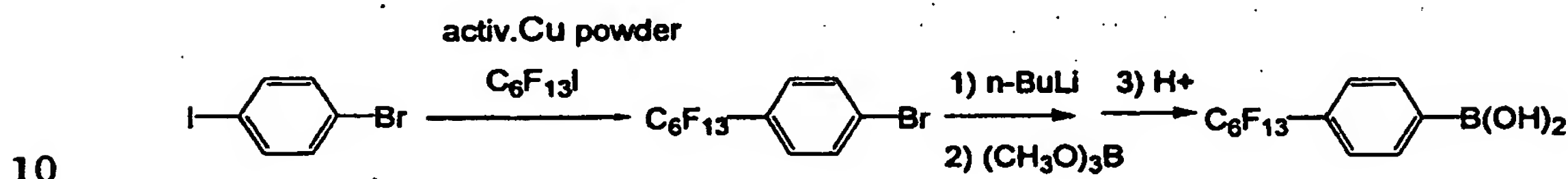
25      ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N) [1-(4-オクチルフェニル) イソキノリン-C<sup>2</sup>, N] イリジウム(III) (例示化合物 No. 305)

<実施例 70>

### 活性化銅粉の調製法

5 硫酸銅 400 g ( 2.5mole ) を熱水 2500ml に溶解させ、室温に冷却した後、同じ温度で亜鉛末 219g ( 3.35mole ) を加える。デカンテーションで水洗した後、5%塩酸を水素ガスが発生しなくなるまで加えて亜鉛を溶かす。銅粉を濾取し、水洗後メタノール洗浄し、乾燥して 149 g の活性化銅粉を得る。

この活性化銅粉を用いて次に示す経路で 4-パーフルオロヘキシルフェニル硼酸を合成することが容易である。



実施例 11 の 4-メチルフェニル硼酸の代わりに 4-パーフルオロヘキシルフェニル硼酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

15 テトラキス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 715)

ビス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 475)

### 20 <実施例 71>

実施例 11 の 4-メチルフェニル硼酸の代わりに 4-パーフルオロヘキシルフェニル硼酸を、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-フルオロイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

5      トリス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 478)

<実施例 72>

10      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-パーフルオロヘキシルフェニルボロン酸を用い、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-4-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

15      ビス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 477)

<実施例 73>

20      実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-パーフルオロヘキシルフェニルボロン酸を、1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-トリフルオロメチルイソキノリンをそれぞれ用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

25      テトラキス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-5-トリフルオロメチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 476)

5 <実施例 74>

実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-フルオロイソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

10 ビス[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)-4-フルオロイソキノリン-C<sup>2</sup>, N] (1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 479)

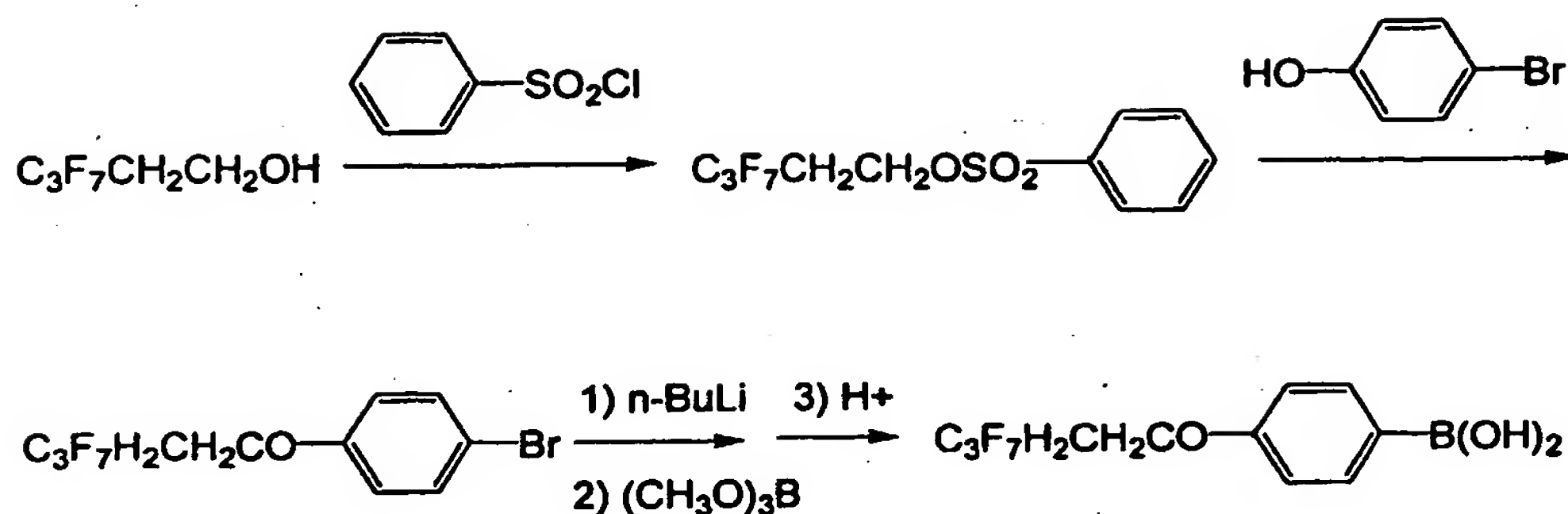
<実施例 75>

15 実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-フェニルイソキノリンを、1-フェニルイソキノリンの代わりに 1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)[1-(4-パーフルオロヘキシルフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 480)

20 <実施例 76>

次に示す経路で 4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニルボロン酸を合成することが容易である。



実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりに 4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス{1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス{1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}(アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス{1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}イリジウム(III) (例示化合物 No. 469)

#### <実施例 77>

実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

ビス{1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 470)

#### <実施例 78>

実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに 1-フェニルイソキノ

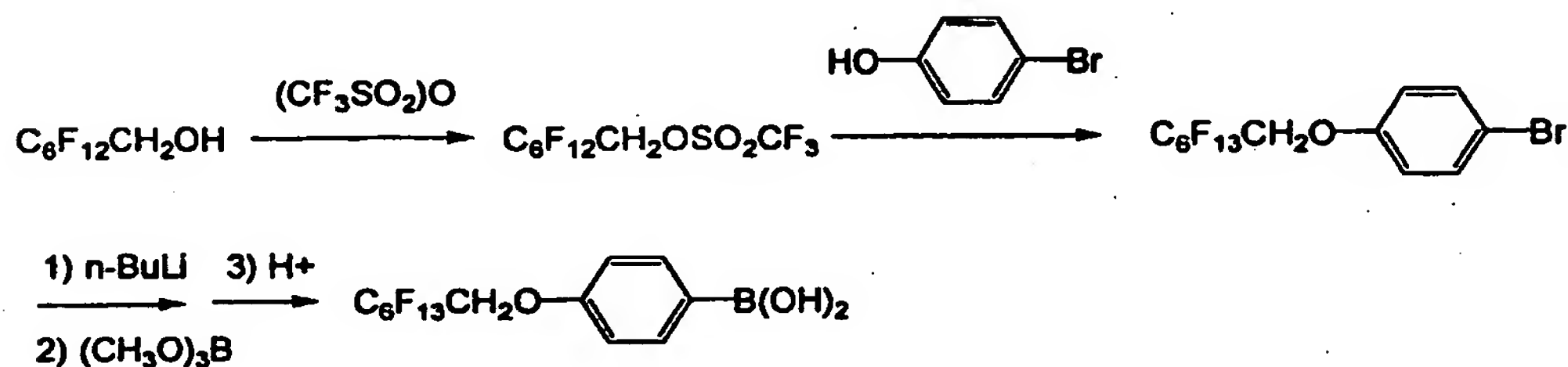


リンを用い、1-フェニルイソキノリンの代わりに1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

- 5      ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N){1-[4-(1H, 1H, 2H, 2H-パーフルオロペンチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}イリジウム(III) (例示化合物 No. 471)

#### <実施例 79>

- 10      次に示す経路で4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ)フェニルボロン酸を合成することが容易である。



実施例 11 の4-メチルフェニルボロン酸の代わりに4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ)フェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

- 15      テトラキス{1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)
- ビス{1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}(アセチルアセトナト)イリジウム(III)
- トリス{1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ)フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}イリジウム(III) (例示化合物 No. 481)
- 20

#### <実施例 80>

実施例 22 の2-フェニルピリジンの代わりに1-[4-(1H, 1H-

パーフルオロヘプチルオキシ) フェニル]イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

ビス{1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ) フェニルイソキノリン]-C<sup>2</sup>, N} (1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 483)

#### <実施例 81>

実施例 22 の 2-フェニルピリジンの代わりに1-フェニルイソキノリンを用い、1-フェニルイソキノリンの代わりに1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ) フェニル]イソキノリンを用いる以外は実施例 22 と同様にして次の化合物を合成することが容易である。

ビス(1-フェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N){1-[4-(1H, 1H-パーフルオロヘプチルオキシ) フェニル]イソキノリン-C<sup>2</sup>, N}イリジウム(III) (例示化合物 No. 484)

#### <実施例 82>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりにフェニルボロン酸を、1-クロロイソキノリンの代わりに1-クロロ-4-ヘキシルイソキノリンを用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

テトラキス(1-フェニル-4-ヘキシルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス(1-フェニル-4-ヘキシルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス(1-フェニル-4-ヘキシルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 156)

#### <実施例 83>

実施例 11 の 4-メチルフェニルボロン酸の代わりにフェニルボロン

酸を用い、1-クロロイソキノリンの代わりに1-クロロ-5-オクチルイソキノリンを用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

5      テトラキス(1-フェニル-5-オクチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)  
(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス(1-フェニル-5-オクチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス(1-フェニル-5-オクチルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 220)

10      <実施例 84>

実施例 11 の4-メチルフェニルボロン酸の代わりに3-ヘプチルオキシフェニルボロン酸を用いる以外は実施例 11 と同様にして以下の化合物を逐次合成することが容易である。

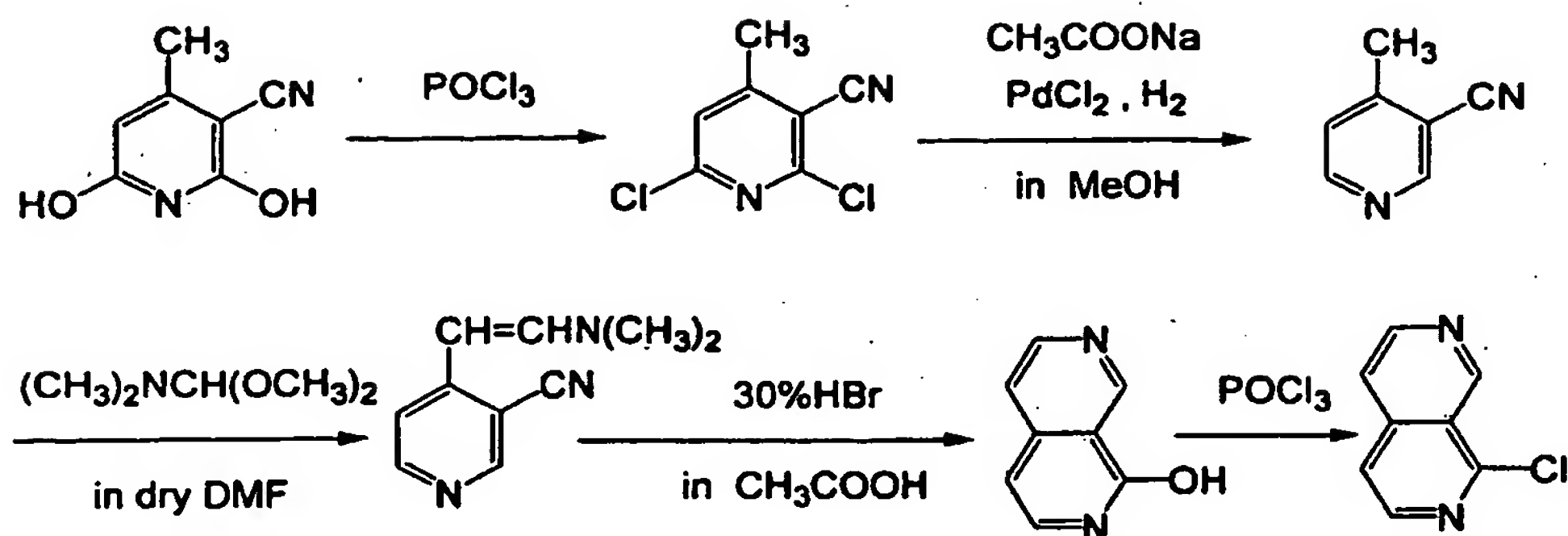
15      テトラキス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)

ビス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N](アセチルアセトナト)イリジウム(III)

トリス[1-(5-ヘプチルオキシフェニル)イソキノリン-C<sup>2</sup>, N]イリジウム(III) (例示化合物 No. 270)

20      <実施例 85>

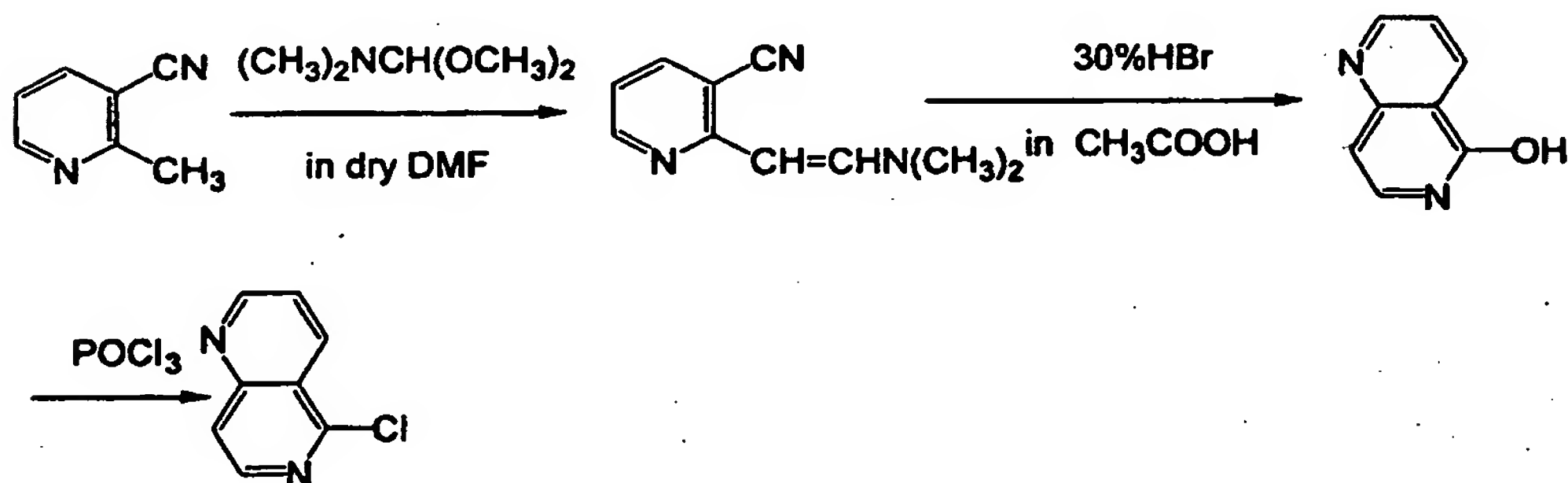
2,6-ジヒドロキシ-4-メチル-3-ピリジンカルボニトリル(アルドリッチ社製、カタログ 37,947-6)を用いて米国特許 4,859,671 号明細書に記載された次に示す経路で1-クロロ-7-アザイソキノリンを合成することが容易である。



実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-7-アザイソキノリンを用いて 1-フェニル-7-アザイソキノリンを合成し、実施例 11 と同様にしてテトラキス(1-フェニル-7-アザイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III)、ビス(1-フェニル-7-アザイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)を順次合成し、トリス(1-フェニル-7-アザイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III)(例示化合物 No. 783)を得ることが容易である。

#### <実施例 86>

- 10 3-メチル-ピコリノニトリル(アルドリッチ社製、カタログ 51,273-7)を用いて米国特許 4,176,183 号明細書に記載された次に示す経路で 1-ヒドロキシ-5-アザイソキノリンを合成し、実施例 85 と同様にして 1-クロロ-5-アザイソキノリンを合成することが容易である。



- 15 実施例 7 の 1-クロロイソキノリンの代わりに 1-クロロ-5-アザイソキノリンを用いて 1-フェニル-5-アザイソキノリンを合成し、実

5 施例 11 と同様にしてテトラキス(1-フェニル-5-アザフェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(μ-ジクロロ)ジイリジウム(III) (例示化合物 No. 763)、ビス(1-フェニル-7-アザフェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)(アセチルアセトナト)イリジウム(III)を順次合成し、トリス(1-フェニル-5-アザフェニルイソキノリン-C<sup>2</sup>, N)イリジウム(III) (例示化合物 No. 640) を得ることが容易である。

<実施例 87~95>

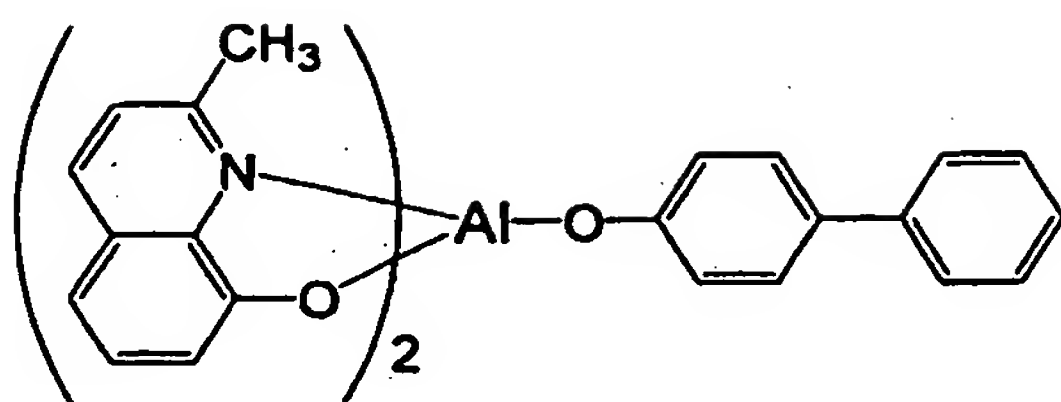
実施例 1 と同様の構成で素子を作成し、これら素子の評価を行った。  
素子構成、膜厚および評価結果を表 25 に示す。

10

表 2 5

| 実施例No | 素子構成   |                       |          |       | 電流                 | 輝度                | 電流効率                 |                      | パワー効率                |                      |
|-------|--------|-----------------------|----------|-------|--------------------|-------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
|       | ホーリ輸送層 | 発光層                   | 励起子拡散防止層 | 電子輸送層 | mA/cm <sup>2</sup> | cd/m <sup>2</sup> | cd/A                 |                      | lm/W                 |                      |
| 87    | α NPD  | CBP:例示化合物No.413(7%)   | BCP      | Alq 3 | 10V印加時             | 10V印加時            | 100cd/m <sup>2</sup> | 300cd/m <sup>2</sup> | 100cd/m <sup>2</sup> | 300cd/m <sup>2</sup> |
|       | 40nm   | 40nm                  | 10nm     | 20nm  | 114                | 800               | 1                    | 0.86                 | 0.4                  | 0.3                  |
| 88    | α NPD  | CBP:例示化合物No.432(7%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                | 10V               | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 20    | 26                 | 1248              | 5.9                  | 5.5                  | 2.8                  | 2.1                  |
| 89    | α NPD  | CBP:例示化合物No.408(5%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                | 10V               | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 9                  | 480               | 6.6                  | 5.6                  | 2.4                  | 1.8                  |
| 90    | α NPD  | CBP:例示化合物No.433(5%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                | 10V               | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 12                 | 700               | 6.69                 | 6.4                  | 2.93                 | 2.32                 |
| 91    | α NPD  | CBP:例示化合物No.433(7%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                |                   | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 12.2               | 876               | 8.6                  | 7.8                  | 3.82                 | 2.9                  |
| 92    | α NPD  | CBP:例示化合物No.433(9%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                |                   | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 18                 | 1180              | 7.5                  | 7.2                  | 3.86                 | 2.9                  |
| 93    | α NPD  | CBP:例示化合物No.517(7%)   | BCP      | Alq 3 | 10V                |                   | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 3.3                | 185               | 5.75                 | 5.42                 | 1.95                 | 1.54                 |
| 94    | α NPD  | CBP:例示化合物No.516(7%)   | Balq     | Alq 3 | 10V                |                   | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 12.5               | 611               | 5.85                 | 5.25                 | 2.42                 | 1.80                 |
| 95    | α NPD  | CBP:Ir例示化合物No.412(7%) | Balq     | Alq 3 | 10V                |                   | 100cd                | 300cd                | 100cd                | 300cd                |
|       | 40     | 40                    | 10       | 60    | 15                 | 778               | 5.3                  | 5.4                  | 2.2                  | 1.9                  |

上記実施例 94 および 95 で励起拡散防止層に用いた化合物 Balq の構造を次に示す。



[産業上の利用可能性]

- 5 以上、説明したように、前記一般式(1)の部分構造を有し、特に式(3)で示される金属配位化合物を、発光中心材料に用いた本発明の発光素子は、高効率発光のみならず、長い期間高輝度を保ち、長波長化が可能な、優れた素子である。また、本発明の発光素子は赤色表示素子として優れた適性を示す。

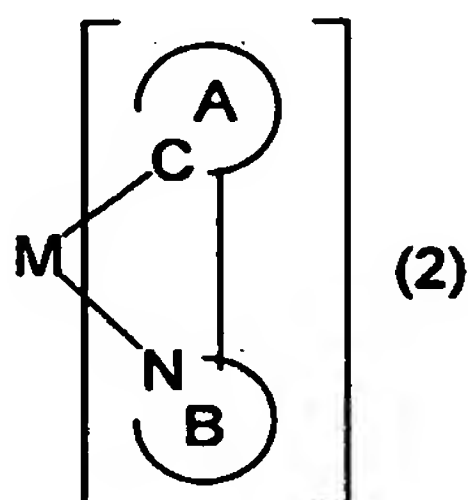


## 請 求 の 範 囲

1. 下記一般式(1)で示される部分構造を少なくとも1つ有することを特徴とする金属配位化合物。



[ここで部分構造MLは下式一般式(2)で表され、



10 式中MはIr, Pt, RhまたはPdの金属原子であり、NとCは、窒素および炭素原子であり、Aは該炭素原子を含み且つ該炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、Bは該窒素原子を含み且つ該窒素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよいイソキノリル基(該イソキノリル基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。)であり、前記環状基Aは前記イソキノリル基の1-位の炭素原子に共有結合している。

15

これら環状基の置換基は、ハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ジ置換アミノ基(該置換基はそれぞれ独立して置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基である。))または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基

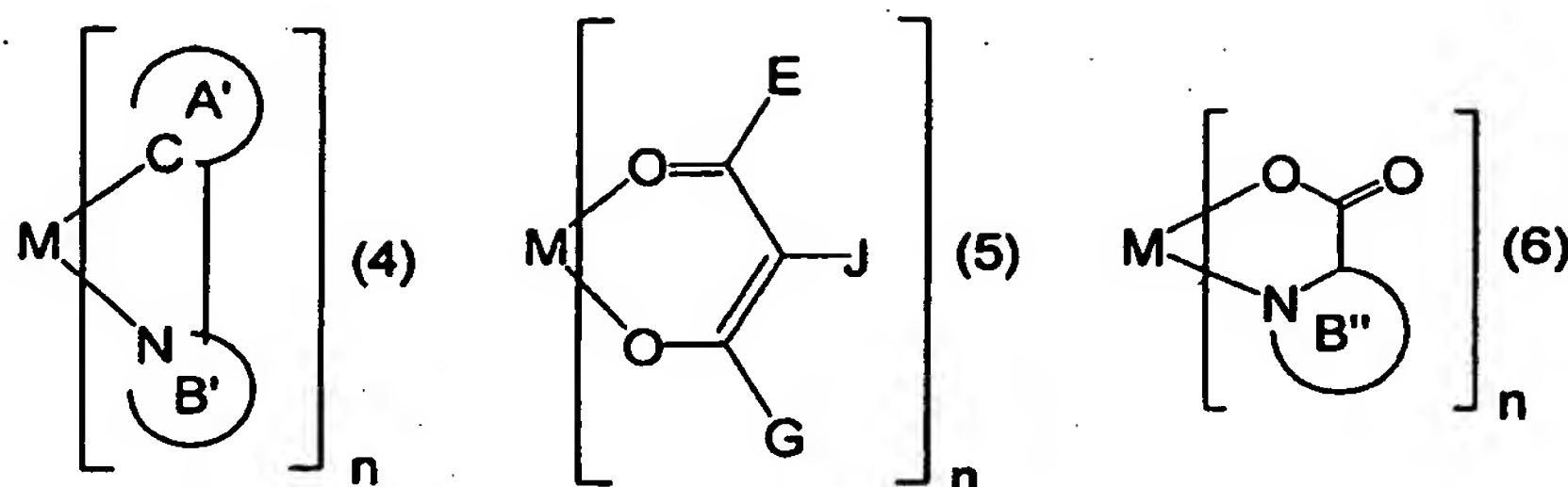
20

である。)、または炭素原子数 1 から 20 の直鎖状または分岐状のアルキル基 (該アルキル基中の 1 つもしくは隣接しない 2 つ以上のメチレン基は  $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$  で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の 1 つもしくは 2 つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい 2 価の芳香環基 (該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基 (該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 8 の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数 1 から 20 の直鎖状または分岐状のアルキル基 (該アルキル基中の 1 つもしくは隣接しない 2 つ以上のメチレン基は  $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$  で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)) を示す。) で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。) から選ばれる。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。

2. 下記一般式 (3) で示されることを特徴とする請求項 1 に記載の金属配位化合物。



[式中 M は Ir, Pt, Rh または Pd の金属原子であり、L および L' は互いに異なる二座配位子を示す。m は 1 または 2 または 3 であり、n は 0 または 1 または 2 である。ただし、m + n は 2 または 3 である。部分構造  $ML'_n$  は下記一般式 (4) または (5) または (6) で示される。



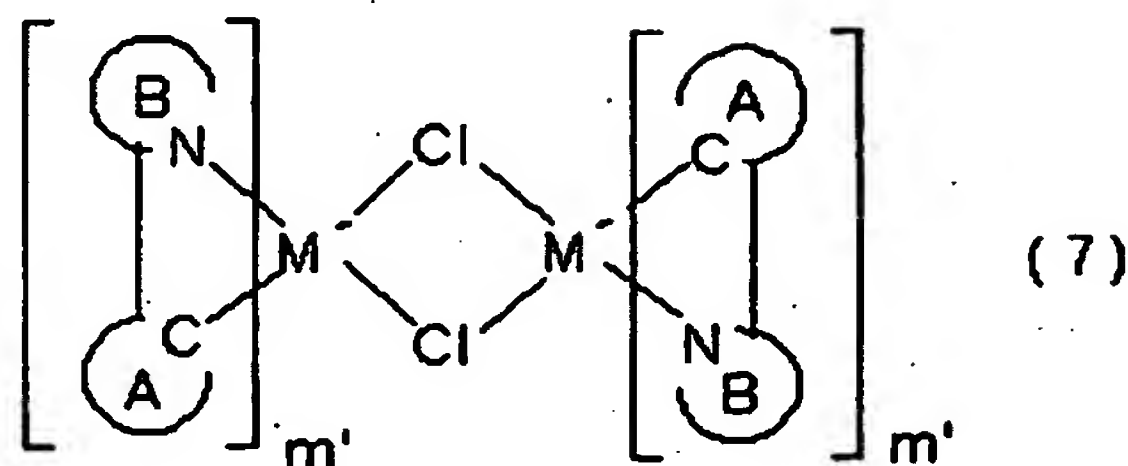
5 NとCは、窒素および炭素原子であり、A' は該炭素原子を含み且つ該炭素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、B' およびB'' はそれぞれ該窒素原子を含み且つ該窒素原子を介して金属原子Mに結合した置換基を有していてもよい環状基であり、前記環状基A' と環状基B' は共有結合によって結合している。

これら環状基の置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、ジ置換アミノ基（該置換基はそれぞれ独立して置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基（該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基である。）、または炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）、トリアルキルシリル基（該アルキル基はそれぞれ独立して、炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。）、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は—O—、—S—、—CO—、—CO—O—、—O—CO—、—CH=CH—、—C≡C—で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価の芳香環基（該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基（該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数1から8の直鎖状または分岐状のアルキル基である。）、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ

以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。}から選ばれる。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。

E, Gおよび J はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 20 の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の 1 つもしくは隣接しない 2 つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の 1 つもしくは 2 つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい 2 価の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、シアノ基、ニトロ基、トリアルキルシリル基(該アルキル基はそれぞれ独立して炭素原子数 1 から 8 の直鎖状または分岐状のアルキル基である。)、炭素原子数 1 から 20 の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の 1 つもしくは隣接しない 2 つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CO-O-$ 、 $-O-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。また、隣接する置換基は結合して環構造を形成してもよい。)で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)またはジ置換アミノ基(該置換基はそれぞれ独立して置換基を有していてもよいフェニル基、ナフチル基(該置換基はハロゲン原子、メチル基またはトリフルオロメチル基である。)または炭素原子数 1 から 8 の直鎖状または分岐状のアルキル基であり、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。また、J は水素原子であってもよい。]

3. 下記一般式(7)で示されることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。



ここでClは塩素原子を意味し、MはイリジウムIrまたはロジウムRhであり、m'は2である。

4. 前記一般式(3)において部分構造ML'が前記一般式(4)で示されることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

5. 前記一般式(3)において部分構造ML'が前記一般式(5)で示されることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

6. 前記一般式(3)において部分構造ML'が前記一般式(6)で示されることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

7. 前記一般式(3)においてnが0であることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

8. 前記環状基Aおよび環状基A'が、それぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、ナフチル基、チエニル基、フルオレニル基、チアナフチル基、アセナフチル基、アントラニル基、フェナンスレニル基、ピレニル基、またはカルバゾリル基(該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれることを特徴とする請求項1および2に記載の金属配位化合物。

9. 前記環状基AおよびA'である芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基、2-ナフチル基、2-チエニル基、2-フルオレニル

基、2-チアナフチル基、2-アントラニル基、2-フェナンスレニル基、2-ピレニル基、または3-カルバゾリル基(該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選ばれることを特徴とする請求項8に記載の金属配位化合物。

5 10. 前記芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基であることを特徴とする請求項9に記載の金属配位化合物。

11. 置換基を有していてもよいフェニル基の環状基Bに結合している位置(1-位)の隣(6-位)が水素原子であることを特徴とする請求項10に記載の金属配位化合物。

10 12. 前記環状基B'および環状基B''が、それぞれ独立して置換基を有していてもよい芳香環基であるイソキノリル基、キノリル基、2-アザアントラニル基、フェナンスリジニル基、ピリジル基、オキサゾリル基、チアゾリル基、ベンゾオキサゾリル基、またはベンゾチアゾリル基(該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換  
15 えられてもよい。)から選ばれることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

13. 前記環状基B'およびB''である芳香環基が、置換基を有していてもよいイソキノリル基またはピリジル基(該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。)から選  
20 ばれることを特徴とする請求項12に記載の金属配位化合物。

14. 前記一般式(4)において環状基B'が置換基を有してもよいイソキノリル基であることを特徴とする請求項2に記載の金属配位化合物。

25 15. 前記環状基A、A'、B、B'およびB''が、それぞれ無置換であるか、あるいはハロゲン原子もしくは、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しな



- い2つ以上のメチレン基は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、 $-CH=CH-$ 、 $-C\equiv C-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい。2価の芳香環基（該置換基はハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基（該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は $-O-$ で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）を示す。）で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。）から選ばれる置換基を有することを特徴とする請求項2
- 10 に記載の金属配位化合物。
16. 前記一般式(7)において環状基Aが、置換基を有していてもよい芳香環基であるフェニル基、ナフチル基、チエニル基、フルオレニル基、チアナフチル基、アセナフチル基、アントラニル基、フェナンスレニル基、ピレニル基、またはカルバゾリル基（該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。）から選ばれることを特徴とする請求項3に記載の金属配位化合物。
- 15
17. 前記芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基、2-ナフチル基、2-チエニル基、2-フルオレニル基、2-チアナフチル基、2-アントラニル基、2-フェナンスレニル基、2-ピレニル基、または3-カルバゾリル基（該芳香環基を構成するCH基の1つまたは2つは窒素原子に置き換えられてもよい。）から選ばれることを特徴とする請求項16に記載の金属配位化合物。
- 20
18. 芳香環基が、置換基を有していてもよいフェニル基であることを特徴とする請求項17に記載の金属配位化合物。
- 25
19. 置換基を有していてもよいフェニル基の環状基Bに結合している位置(1-位)の隣(6-位)が水素原子であることを特徴とする請求項

1 8に記載の金属配位化合物。

2 0. 前記一般式(7)において環状基AおよびBが、それぞれ無置換であるか、あるいはハロゲン原子、もしくは炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-、-S-、-CO-、-CH=CH-、-C≡C-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の1つもしくは2つ以上のメチレン基は置換基を有していてもよい2価の芳香環基(該置換基はハロゲン原子、炭素原子数1から20の直鎖状または分岐状のアルキル基(該アルキル基中の1つもしくは隣接しない2つ以上のメチレン基は-O-で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)を示す。)で置き換えられていてもよく、該アルキル基中の水素原子はフッ素原子に置換されていてもよい。)から選ばれる置換基を有することを特徴とする請求項3に記載の金属配位化合物。

15 2 1. 前記一般式(1)において、Mがイリジウムであることを特徴とする請求項1に記載の金属配位化合物。

2 2. 前記一般式(7)において、Mがイリジウムであることを特徴とする請求項3に記載の金属配位化合物。

20 2 3. 前記一般式(2)で示される部分構造MLを持つ金属配位化合物であって、下記一般式(8)で示されることを特徴とする請求項1または2に記載の金属配位化合物。



25 [前記Irはイリジウム、部分構造Ph-IsoQは(1-フェニルイソキノリル)基、置換基R及び置換基R'は水素またはフッ素、または直鎖または分岐のアルキル基(該アルキル基は $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$ -で表され、HはFに、隣接しないメチレン基は酸素に置き換わっても良く、nは1から20の

整数を表す)を示し、 $p$ 及び $q$ はそれぞれ前記フェニル基及び前記イソキノリル基に結合した置換基 $R$ および $R'$ の数を示し、1以上の整数を示し、前記Phの2-位の炭素原子とIsoQの窒素原子がIrと配位結合をしている。]

5      24. 前記一般式(8)において部分構造 $R_p$ -Ph-が(4-アルキルフェニル)基であり、置換基 $R'$ が水素であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

25. 前記一般式(8)において置換基 $R$ が水素であり、 $R' q$ が1個の4-または5-位に置換したフルオロ基またはトリフルオロメチル基  
10      であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

26. 前記一般式(8)において部分構造 $R_p$ -Ph-が(5-フルオロフェニル)基であり、 $R' q$ が1個の水素、または4-もしくは5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

15      27. 前記一般式(8)において部分構造 $R_p$ -Ph-が(4-フルオロフェニル)基であり、 $R' q$ が1個の水素、または4-もしくは5-位に置換したフルオロ基またはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

28. 前記一般式(8)において部分構造 $R_p$ -Ph-が(3,5-ジフルオロフェニル)基であり、 $R' q$ が1個の水素、または4-もしくは5-  
20      位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

29. 前記一般式(8)において部分構造 $R_p$ -Ph-が(3,4,5-トリフルオロフェニル)基であり、 $R' q$ が1個の水素、または4-もしくは  
25      5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

30. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(4-トリフルオロメチルフェニル)基であり、 $R'_q$ が1個の水素、または4-もしくは5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

5 31. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(5-トリフルオロメチルフェニル)基であり、 $R'_q$ が1個の水素、または4-もしくは5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

10 32. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(1-(3,4,5,6-テトラフルオロメチル)フェニル)基であり、 $R'_q$ において、 $q$ は1または6であり、 $R'$ は水素、または4-もしくは5-位に置換したトリフルオロメチル基、または3,4,5,6,7,8-ヘキサフルオロ基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

15 33. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(4-アルキルフェニル)基(該アルキル基は炭素数1から6までの直鎖状または分岐状のアルキル基を表す)であり、 $R'_q$ は水素であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

20 34. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(4-アルコキシフェニル)基(該アルコキシ基は炭素数1から6までの直鎖状または分岐状アルコキシ基を表す)であり、 $R'_q$ は水素であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

25 35. 前記一般式(8)において部分構造  $R_p-Ph-$ が(4-トリフルオロメチルオキシフェニル)基であり、 $R'_q$ が1個の水素、または4-もしくは5-位に置換したフルオロ基もしくはトリフルオロメチル基であることを特徴とする請求項23に記載の金属配位化合物。

36. 前記一般式(3)で表される金属配位化合物であって、下記一

般式 (9) で示される請求項 2 に記載の金属配位化合物。



ここで Ir はイリジウムを表す。

37. 前記一般式 (9) で示される金属配位化合物であって、  
5 前記  $\text{L}_n$  は、一般式 [4-アルキルフェニルイソキノリン]<sub>2</sub> (ここで前記アルキル基は  $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$  で表され、 $n$  は 1 から 8 までの整数を示す。) で表され、前記  $\text{L}'_n$  は、[1-フェニルイソキノリン]であることを特徴とする請求項 36 に記載の金属配位化合物。

38. 前記一般式 (9) で示される金属配位化合物であって、前記  
10  $\text{L}_n$  は一般式 [1-フェニルイソキノリン]<sub>2</sub> で表され、前記  $\text{L}'_n$  は、[4-アルキルフェニルイソキノリン] (ここでアルキル基の炭素数は 1 から 8) であることを特徴とする請求項 36 に記載の金属配位化合物。

39. 前記一般式 (1) において、置換基を有してもよいイソキノリン基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つが窒素原子に置き換えられていることを特徴とする請求項 1 に記載の金属配位化合物。  
15

40. 前記一般式 (7) において、置換基を有してもよいイソキノリン基を構成する CH 基の 1 つまたは 2 つが窒素原子に置き換えられていることを特徴とする請求項 3 に記載の金属配位化合物。

41. 基体上に設けられた一对の電極間に、少なくとも一種の有機化合物を含む発光部を備える有機発光素子であって、前記有機化合物が前記請求項 1 に記載の一般式 (1) で示される部分構造を少なくとも 1 つ有する金属配位化合物を含むことを特徴とする有機発光素子。  
20

42. 前記有機化合物が下記一般式 (3) で示される構造を有する金属配位化合物を含むことを特徴とする請求項 41 に記載の有機発光素子。

25 43. 前記有機化合物が下記一般式 (8) で示される構造を有する金属配位化合物を含むことを特徴とする請求項 41 に記載の有機発光素子。

- 4 4. 前記有機化合物が下記一般式（9）で示される構造を有する金属配位化合物を含むことを特徴とする請求項 4 1 に記載の有機発光素子。
- 4 5. 前記電極間に電圧を印加することにより燐光を発光することを特徴とする請求項 4 1 に記載の有機発光素子。
5. 4 6. 前記燐光の発光色が赤であることを特徴とする請求項 4 5 に記載の有機発光素子。
- 4 7. 前記請求項 4 1 から 4 6 のいずれかに記載の有機発光素子と、前記有機発光素子に電気信号を供給する手段とを具備した画像表示装置。



図 1

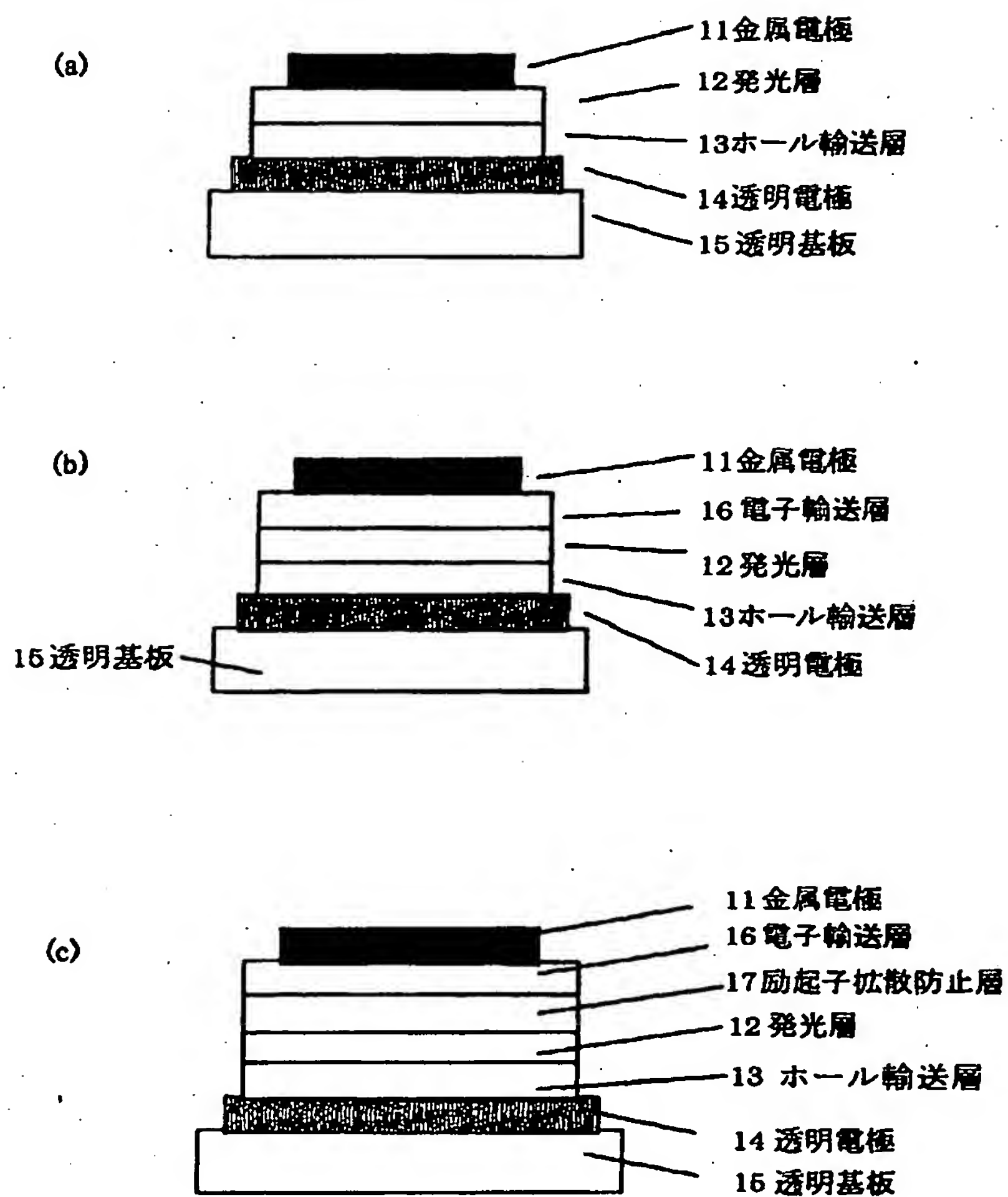




図 2

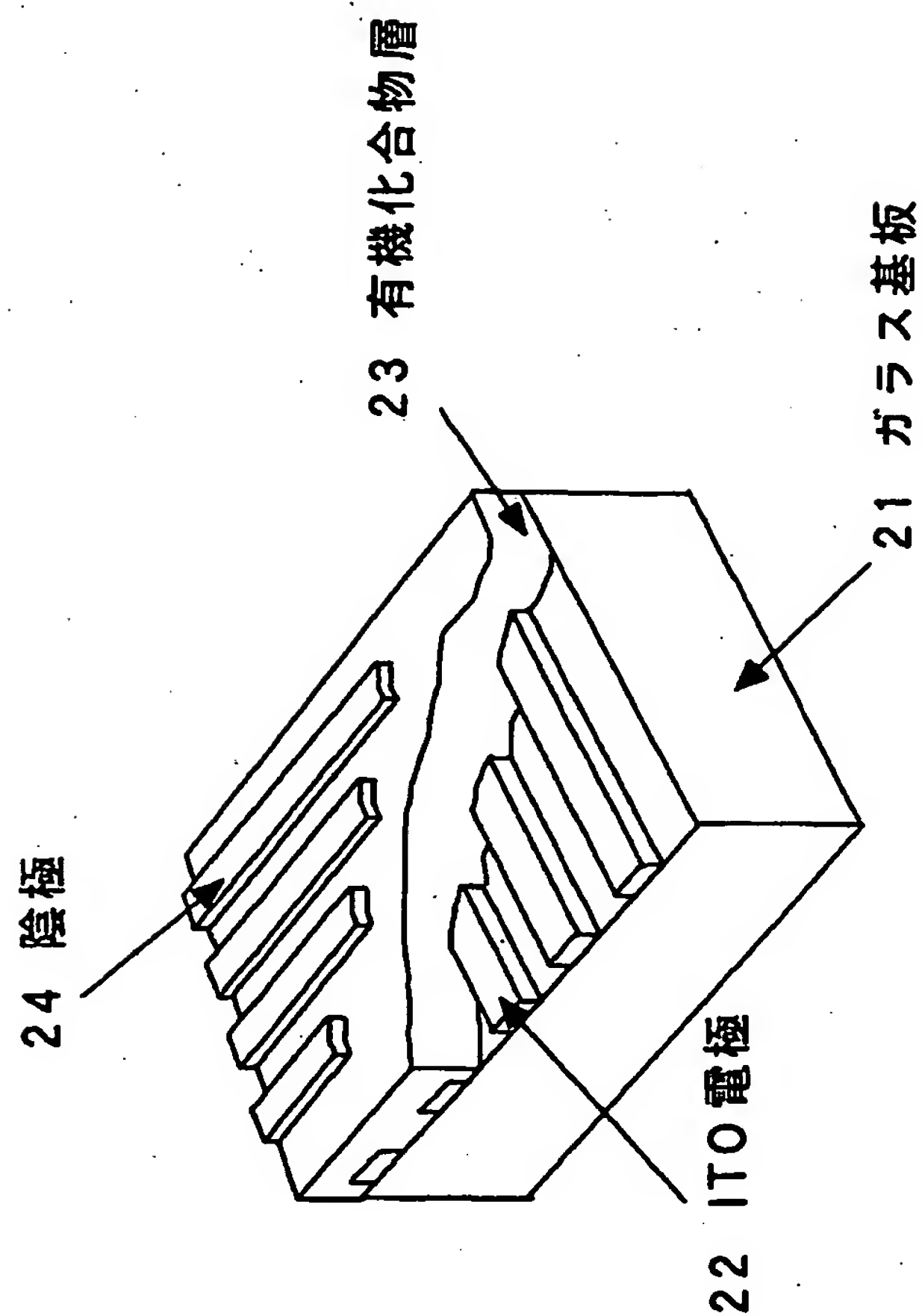


図 3

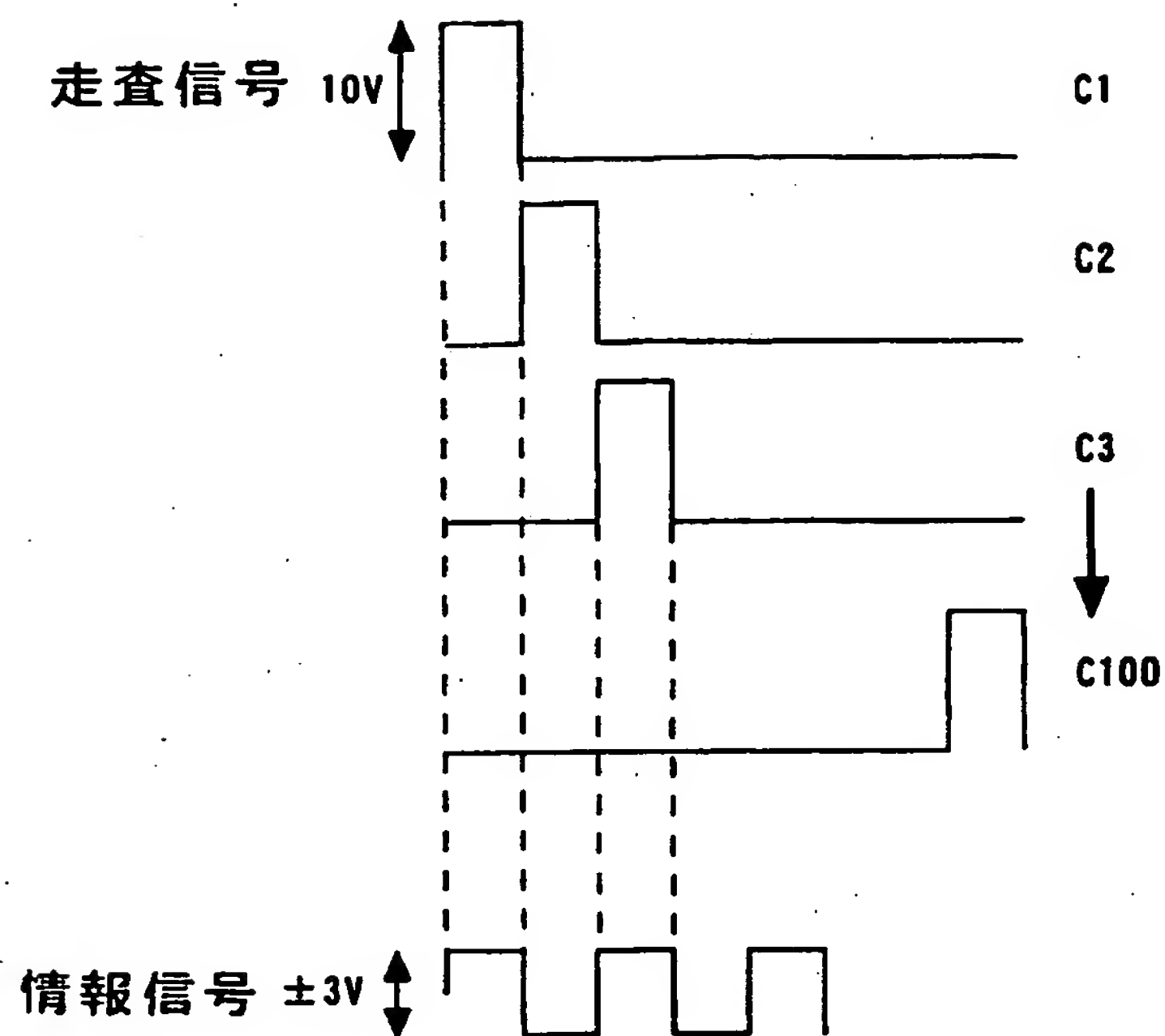


図 4

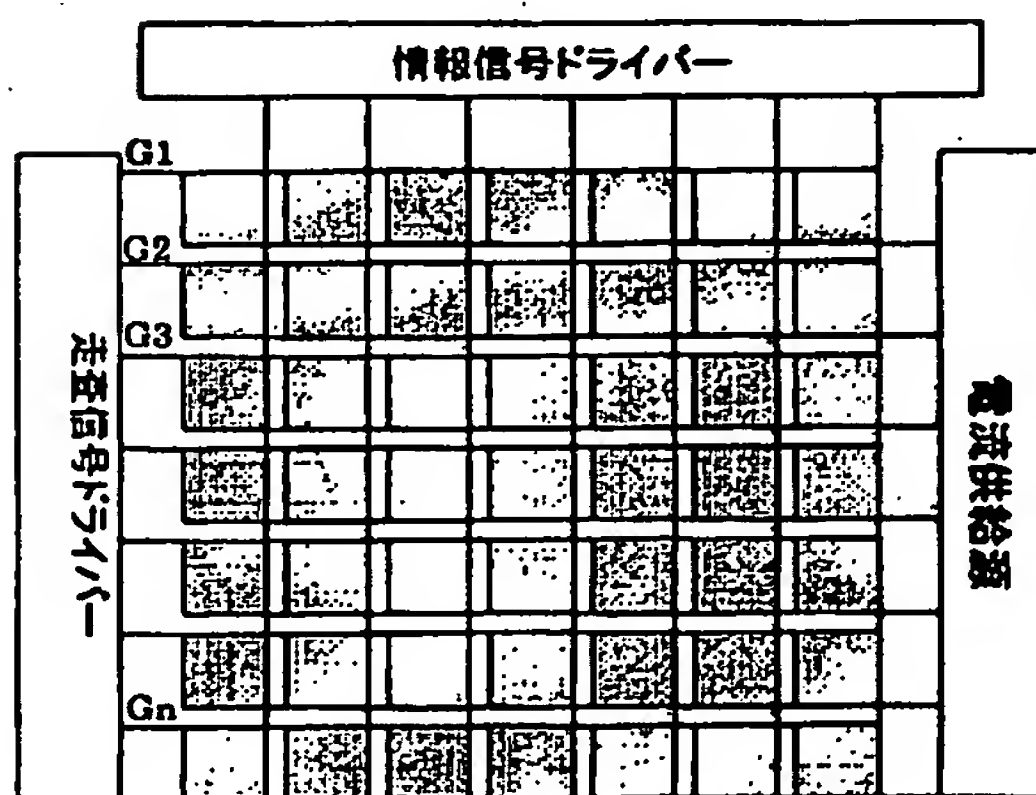


図 5

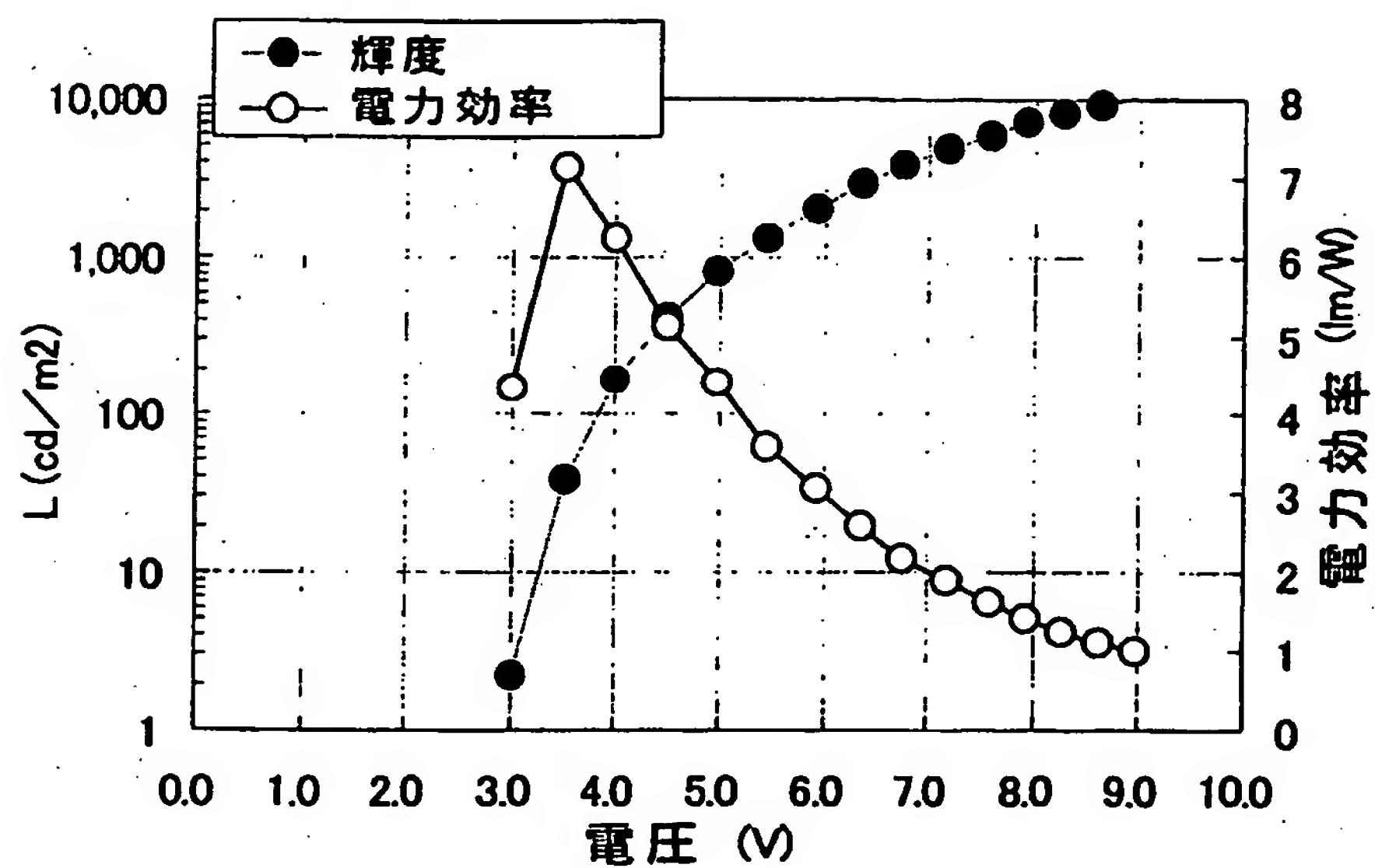
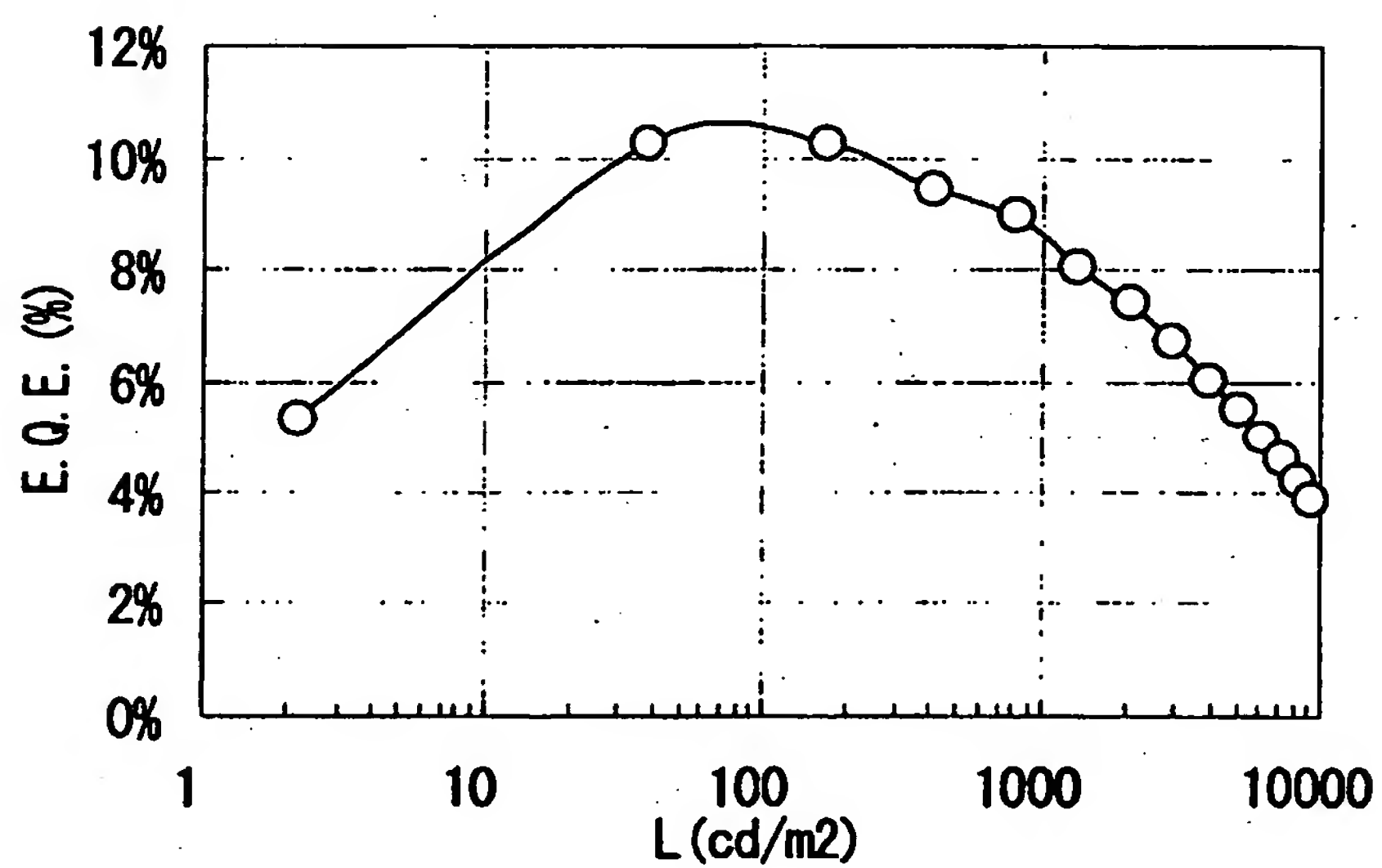


図 6



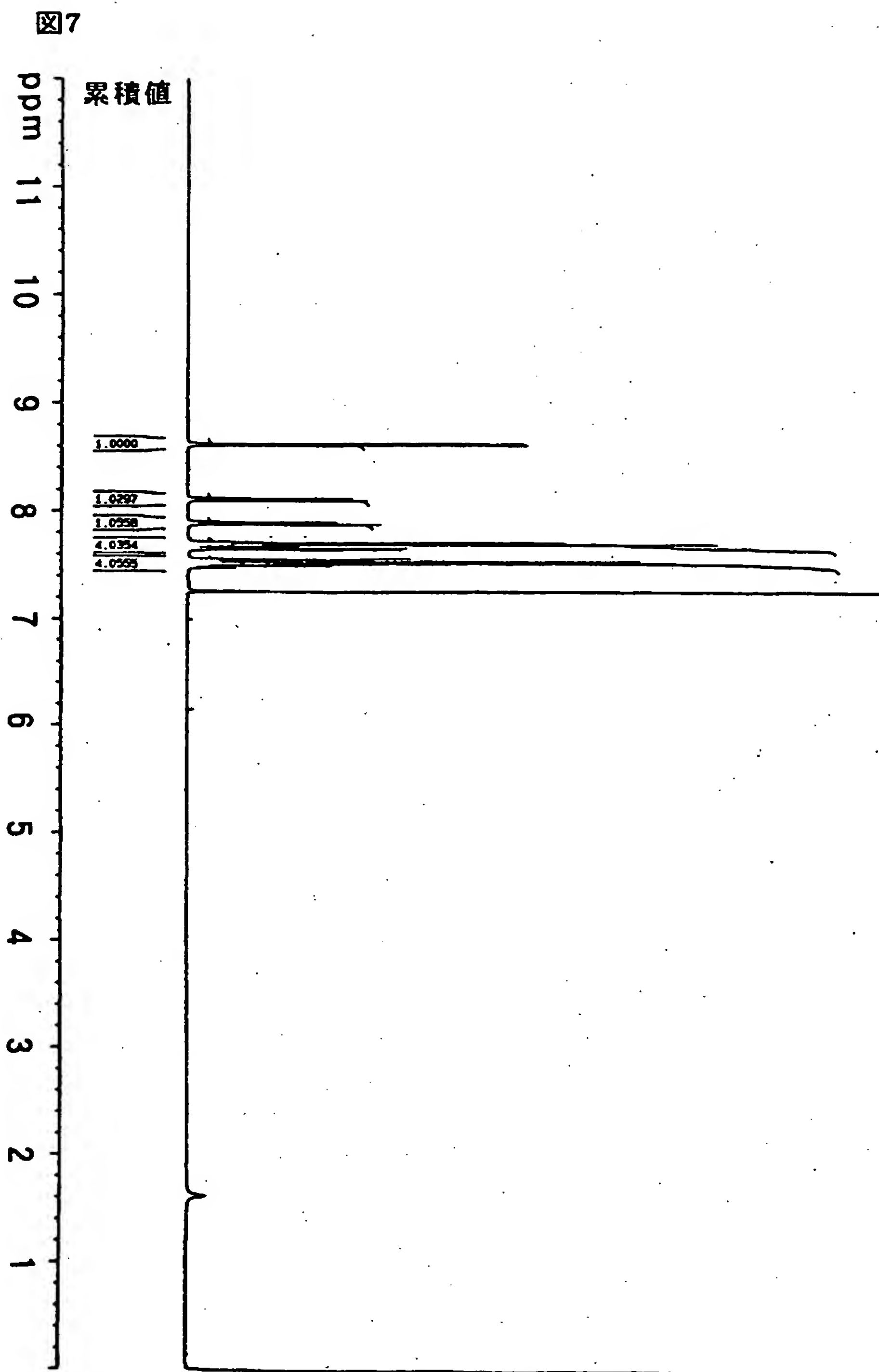


図8

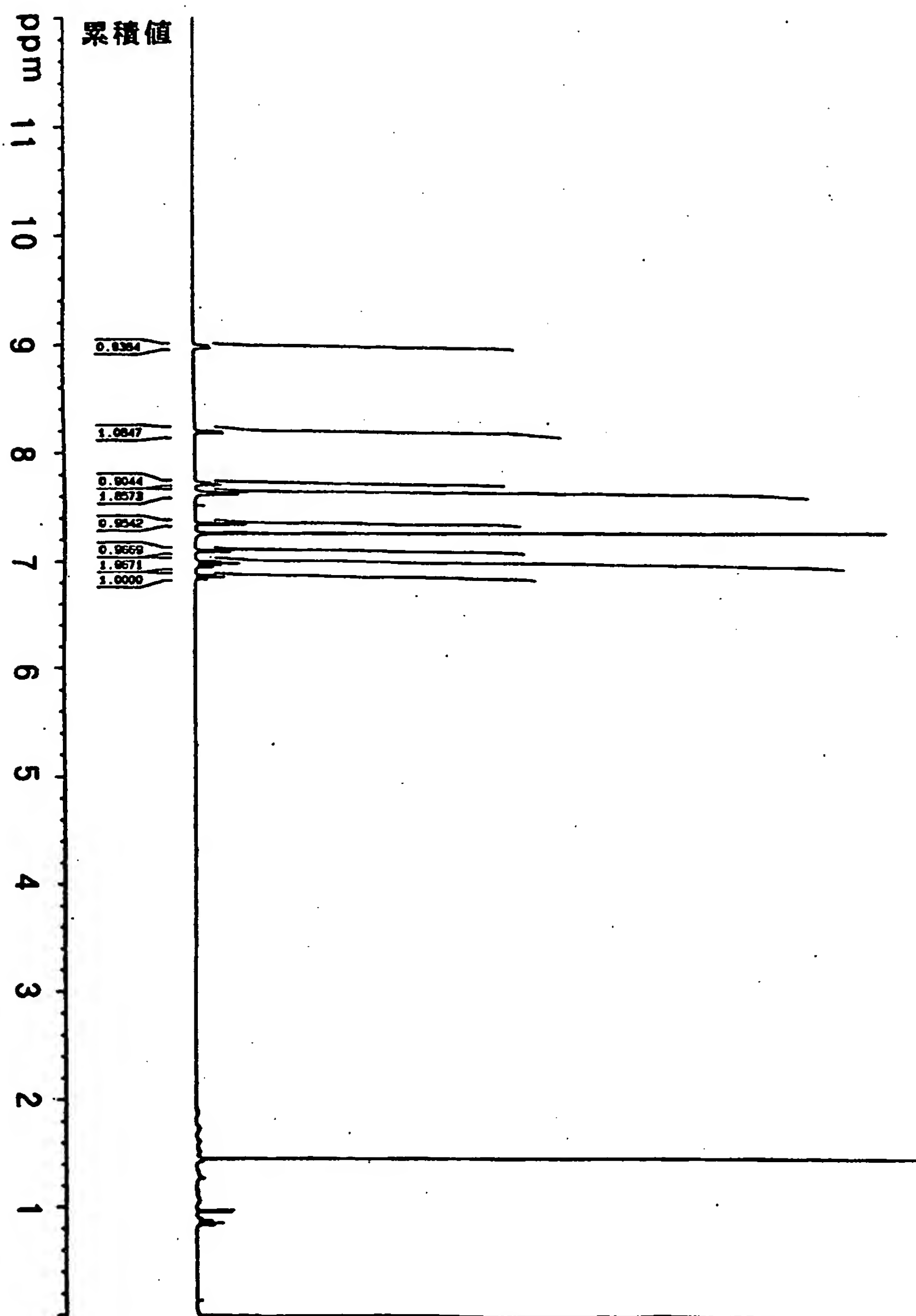


図9

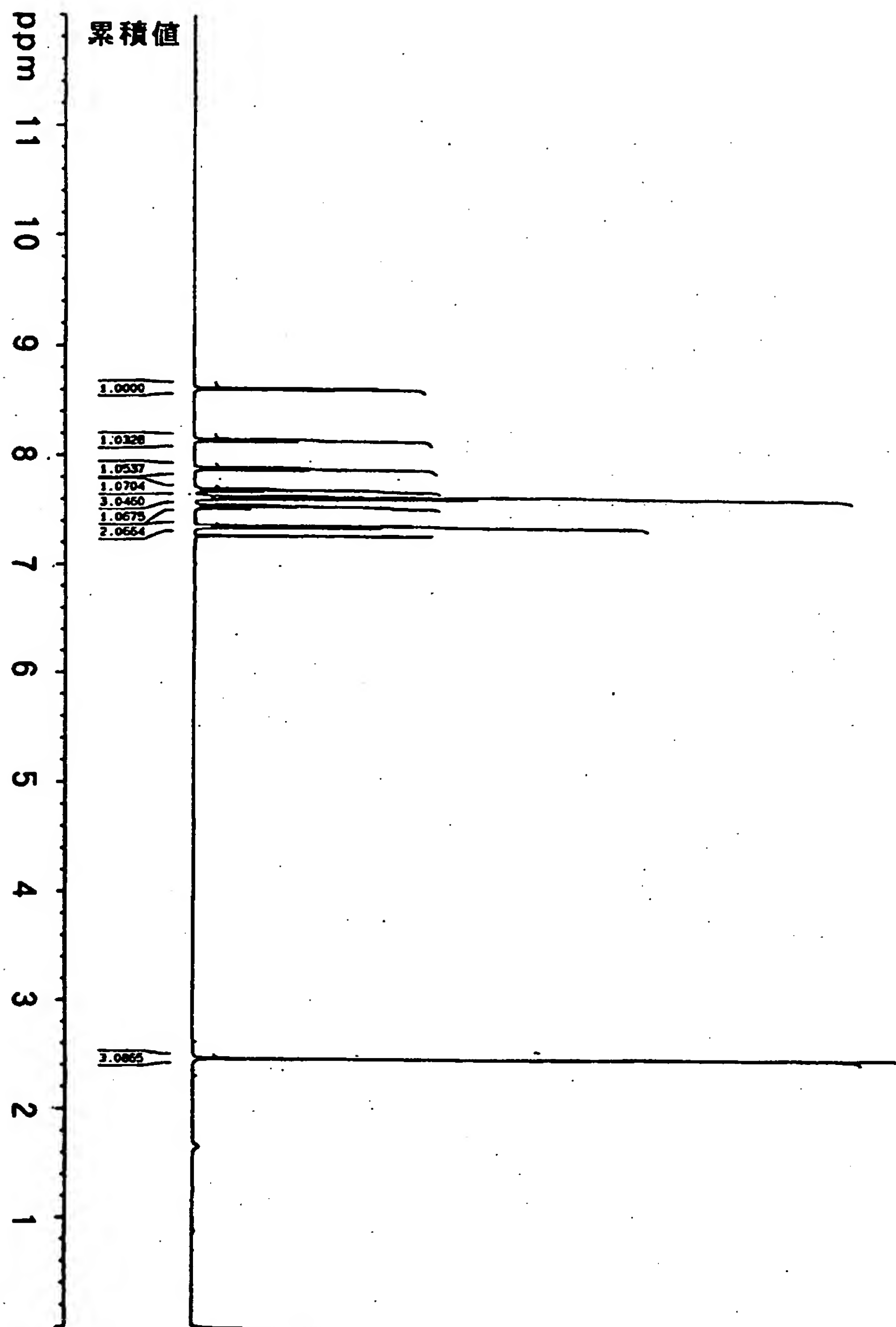


図10

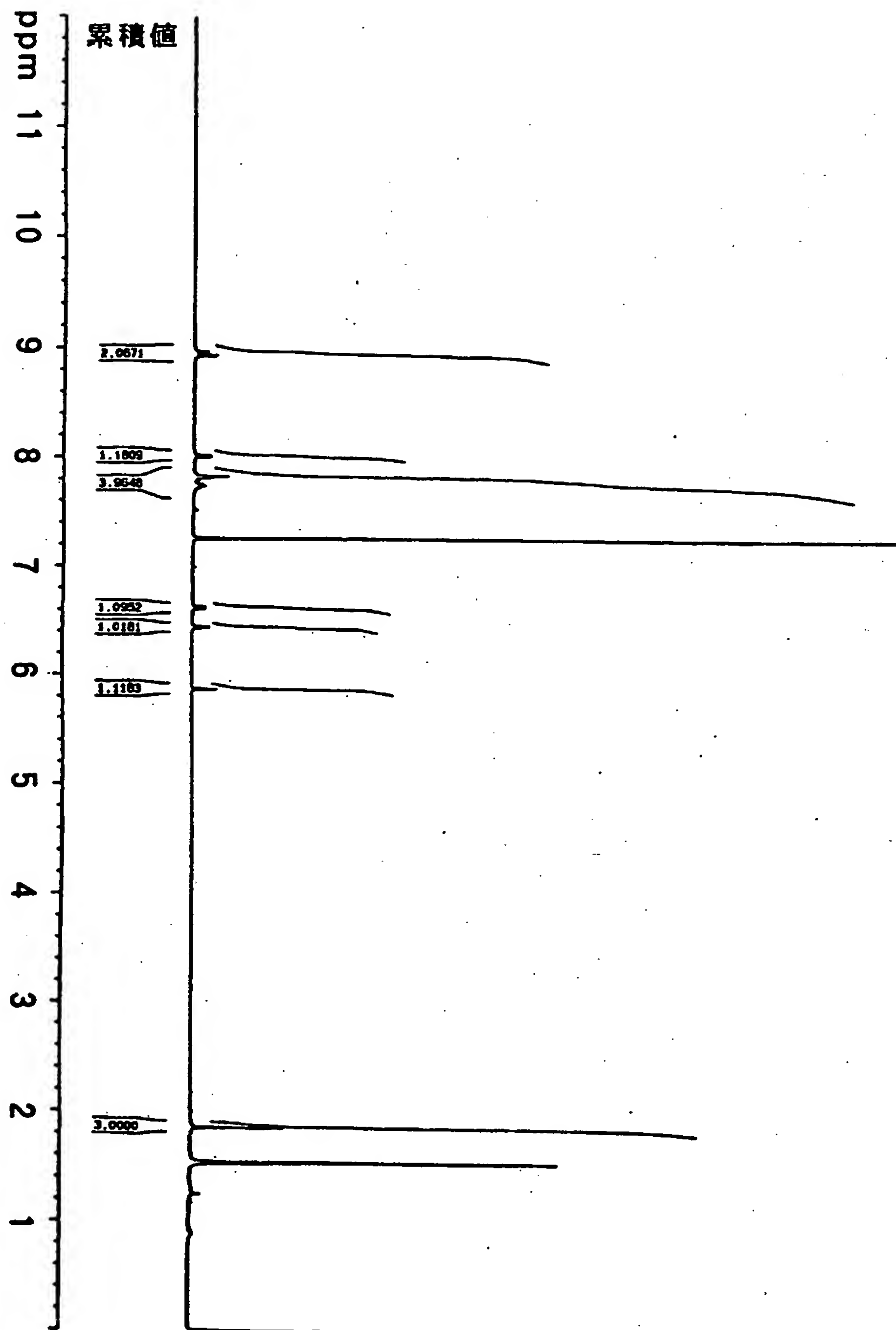
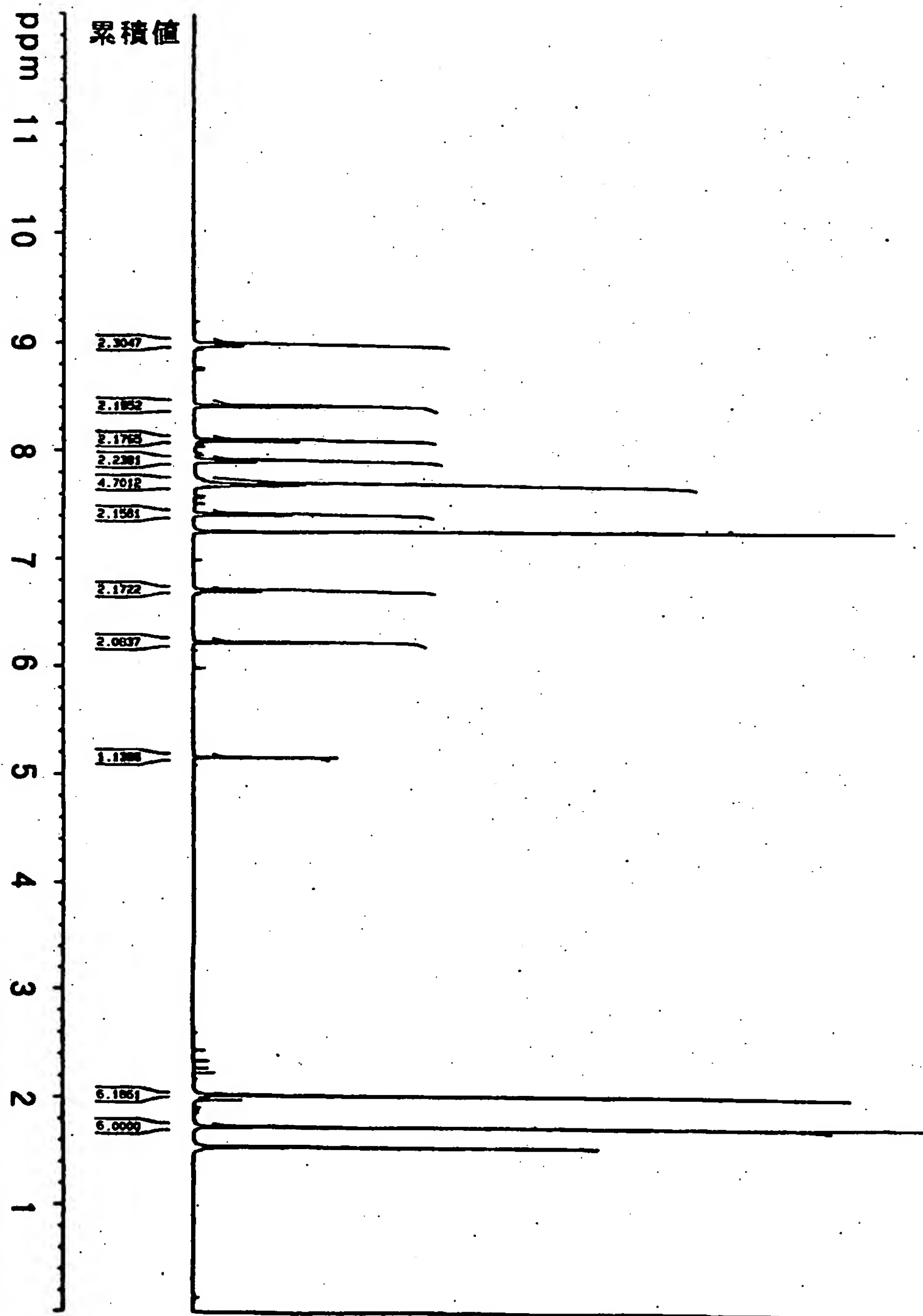




図11



差替え用紙 (規則26)

図12

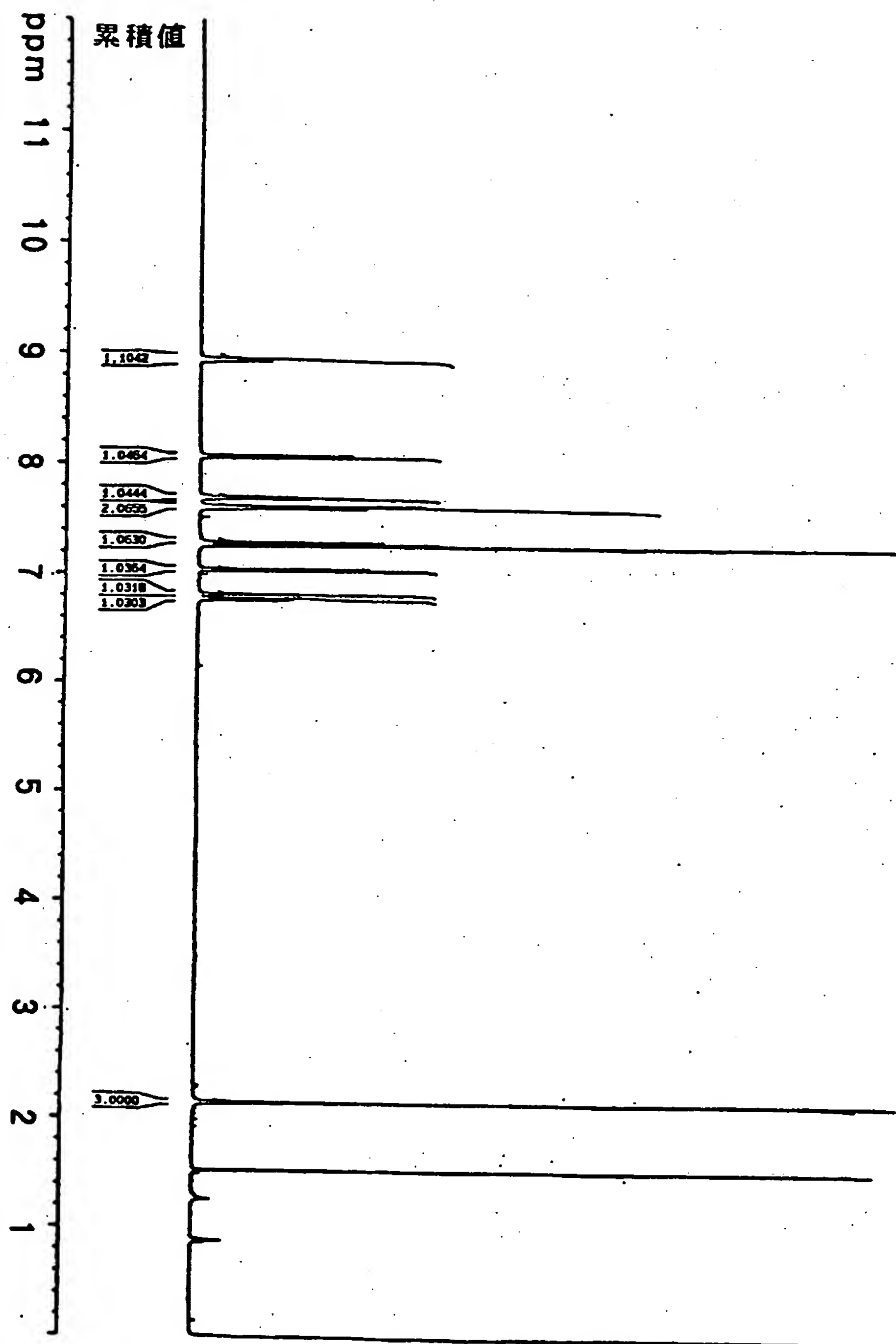
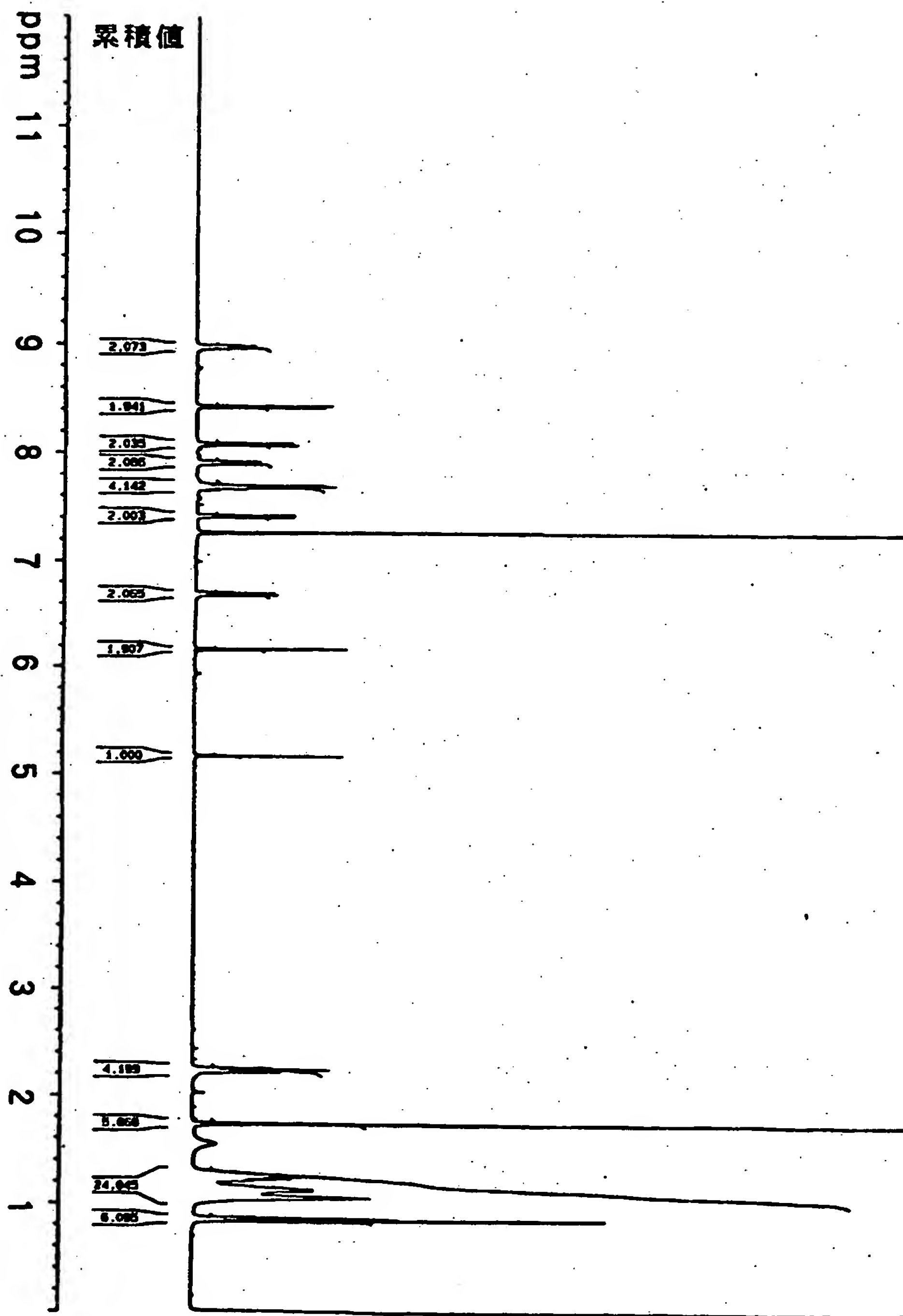


図13



# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP01/10487

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int.Cl<sup>7</sup> C07F15/00, C07F19/00, C09K11/06, H05B33/14

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int.Cl<sup>7</sup> C07F15/00, C07F19/00, C09K11/06, H05B33/14

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAPLUS (STN), REGISTRY (STN)

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages  | Relevant to claim No. |
|-----------|---|-----------------------|
| PX        | US 2001/0019782 A1 (Tatsuya IGARASHI),<br>06 September, 2001 (06.09.2001),<br>& JP 2001-247859 A & JP 2001-345183 A   | 1-47                  |
| X<br>A    | NAVARRO-RANNINGER, Carmen et al., "A cyclometalated<br>Pd(II) complex containing a cytosine model nucleobase",<br>J. Organomet. Chem., (1998), Vol.558, Nos. 1-2,<br>pages 103 to 110 | 1, 7-10<br>2-6, 11-47 |

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

- "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- "E" earlier document but published on or after the international filing date
- "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

- "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
- "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
- "&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search  
22 January, 2002 (22.01.02)

Date of mailing of the international search report  
05 February, 2002 (05.02.02)

Name and mailing address of the ISA/  
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

## A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl. C07F15/00, C07F19/00, C09K11/06, H05B33/14

## B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int. Cl. C07F15/00, C07F19/00, C09K11/06, H05B33/14

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAPLUS (STN), REGISTRY (STN)

## C. 関連すると認められる文献

| 引用文献の<br>カテゴリー* | 引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示   | 関連する<br>請求の範囲の番号      |
|-----------------|---|-----------------------|
| P X             | US 2001/0019782 A1 (Tatsuya Igarashi)<br>2001.09.06 & JP 2001-247859 A & JP 2001-345183 A   | 1-47                  |
| X<br>A          | NAVARRO-RANNINGER, Carmen et. al.,<br>A cyclometalated Pd(II) complex containing a cytosine model<br>nucleobase,<br>J. Organomet. Chem., 1998, Vol. 558 No. 1-2, p. 103-110 | 1, 7-10<br>2-6, 11-47 |

☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

## \* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&amp;」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

22.01.02

国際調査報告の発送日

05.02.02

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

本堂 裕司



4H

9049

電話番号 03-3581-1101 内線 3443